

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа информационных технологий и робототехники
Направление подготовки Прикладная математика и информатика
Отделение школы (НОЦ) Отделение информационных технологий

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Моделирование формирования ионно-модифицированных слоёв железа
УДК 004.94:669.11:539.2:539.1

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
8БМ71	Набокова Ольга Олеговна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Коваль Т. В.	д.ф-м.н, проф.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	к.ф.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД ШБИП	Алексеев Н.А.	-		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Коваль Т.В.	д.ф-м.н., проф.		

Томск – 2019 г.

Планируемые результаты обучения по направлению подготовки

01.04.02 Прикладная математика и информатика

Код подразделения	Результат обучения
1	2
Общекультурные компетенции	
ОК-1	Способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу.
ОК-2	Готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения.
ОК-3	Готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала.
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК-1	Готовность к коммуникации в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном языке для решения задач профессиональной деятельности.
ОПК-2	Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия.
ОПК-3	Способность самостоятельно приобретать с помощью информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения, в том числе, в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности, расширять и углублять свое научное мировоззрение.
ОПК-4	Способность использовать и применять углубленные знания в области прикладной математики и информатики.
ОПК-5	Способность использовать углубленные знания правовых и этических норм при оценке последствий своей профессиональной деятельности, при разработке и осуществлении социально значимых проектов.

Профессиональные компетенции	
ПК-1	Способность проводить научные исследования и получать новые научные и прикладные результаты самостоятельно и в составе научного коллектива.
ПК-2	Способность разрабатывать концептуальные и теоретические модели решаемых научных проблем и задач.
ПК-3	Способность углубленного анализа проблем, постановки и обоснования задач научной и проектно-технологической деятельности.
ПК-4	Способность разрабатывать концептуальные и теоретические модели решаемых задач проектной и производственнотехнологической деятельности.
ПК-5	Способность управлять проектами, планировать научноисследовательскую деятельность, анализировать риски, управлять командой проекта.
ПК-6	Способность организовывать процессы корпоративного обучения на основе технологий и развития корпоративных баз знаний.
ПК-7	Способность разрабатывать и оптимизировать бизнес-планы научно-прикладных проектов.
ПК-8	Способность разрабатывать корпоративные стандарты и профили функциональной стандартизации приложений, систем, информационной инфраструктуры.
ПК-9	Способность к преподаванию математических дисциплин и информатики в образовательных организациях основного общего, среднего общего, среднего профессионального и высшего образования.
ПК-10	Способность разрабатывать учебно-методические комплексы для электронного и мобильного обучения.
ПК-11	Способность разрабатывать аналитические

	обзоры состояния области прикладной математики и информационных технологий.
ПК-12	Способность к взаимодействию в рамках международных проектов и сетевых сообществ.
ПК-13	Способность осознавать корпоративную политику в области повышения социальной ответственности бизнеса перед обществом, принимать участие в ее развитии.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа информационных технологий и робототехники
Направление подготовки (специальность) Прикладная математика и информатика
Отделение школы (НОЦ) Отделение информационных технологий

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП

(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
8БМ71	Набокова Ольга Олеговна

Тема работы:

Моделирование формирования ионно-модифицированных слоёв железа с учётом распыления поверхности ионами азота	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Железная мишень, на поверхности которой при воздействии ионов азота (азотировании), формируются ионно-модифицированные слои.
---------------------------------	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	Рассмотрение диффузионной модели, модели формирования ионно-модифицированных слоёв (фаз) железа; Получение системы уравнений для самосогласованной динамики слоев с учетом распыления поверхности; Сопоставление результатов численного и аналитического моделирования с экспериментом; Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; Социальная ответственность.
Перечень графического материала	Мультимедийная презентация в формате .pptx
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Меньшикова Екатерина Валентиновна
Социальная ответственность	Алексеев Николай Архипович
Английский язык	Сидоренко Татьяна Валерьевна
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
Результаты экспериментов	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Коваль Т.В.	д.ф-м.н., проф.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
8БМ71	Набокова Ольга Олеговна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
8БМ71	Набоковой Ольге Олеговне

Школа	ИШИТР	Отделение школы (НОЦ)	ОИТ
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	01.04.02 Прикладная математика и информатика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	– Заработная плата (руководителя 47104 руб. в месяц, магистра 12663 руб. в месяц) – Бюджет затрат НТИ 261573 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Тариф на электроэнергию – 5.8 руб. за 1 кВт·ч
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	– Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды – 27.1 %. – Районный коэффициент – 1.3 – Коэффициент накладных расходов – 30%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	– Сравнение с другими схожими материалами
2. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	– Иерархическая структура работ; – SWOT-анализ; – определение трудоемкости работ.
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Бюджет научно-технического исследования: – расчет материальных затрат; – расчет основной платы исполнителей темы; – накладные расходы; – формирование бюджета затрат.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Диаграмма Исикавы
2. Матрица SWOT
3. Альтернативы проведения НИ
4. График проведения и бюджет НИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	к.ф.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
8БМ71	Набокова Ольга Олеговна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
8БМ71	Набоковой Ольге Олеговне

Школа	ИШИТР	Отделение школы (НОЦ)	ОИТ
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	01.04.02 Прикладная математика и информатика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

Характеристика объекта исследования (вещество, материал, рабочая зона) и области его применения

Железная мишень, на поверхности которой формируются ионно-модифицированные слои при воздействии на нее потока ионов азота.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

2. Производственная безопасность
2.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения
2.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения

Вредные факторы:
1. Отклонения показателей микроклимата;
2. Недостаточная освещенность рабочей зоны;
3. Превышение уровня шума;
4. Повышенный уровень электромагнитных излучений;
Опасные факторы:
1. Электрический ток
2. Опасность возникновения пожара

3. Экологическая безопасность

Источники выбросов в атмосферу;
Образование сточных вод и отходов.
Мероприятия по снижению вредного воздействия на ОС

4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Вероятные ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения и меры по их предупреждению

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД ШБИП	Алексеев Н.А.	-		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
8БМ71	Набокова Ольга Олеговна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 119 с., 19 рис., 18 табл., 19 источников, 1 приложение.

Ключевые слова: Диффузия, уравнение диффузии, коэффициент диффузии, концентрация, диффундирующий поток, азотирование металлов, диаграмма фазовых состояний, скорость распыления.

Объектом исследования является железная мишень, на поверхности которой формируются ионно-модифицированные слои при воздействии на нее потока ионов азота.

Цель работы – построение модели и исследование основных закономерностей диффузионных процессов при азотировании железа, ознакомление с физикой и моделями процесса.

В результате исследования построена модель и приведены исследования влияния температуры азотирования, концентрации азота на поверхности азотируемого железа и распыления поверхности.

Модель была реализована в математическом пакете Matlab с открытым программным кодом, что позволяет вносить коррективы в модель.

Результаты моделирования могут быть использованы при оптимизации и управлении режимами плазменной, ионно-пучковой обработки материалов для образования модифицированных слоев с заданными свойствами.

Область применения: моделирование динамики формирования нитридных слоев железа и сталей для прогнозирования модифицированных приповерхностных слоёв.

Данный проект предполагает получение экономической, социологической и ресурсной эффективности.

Оглавление

Введение	13
I Нестационарное уравнение диффузии.....	15
1.1 Общее определение диффузии. Законы Фика	15
1.1.1 Нестационарное уравнение диффузии	21
1.2 Постановка краевых задач о зависимости концентрации вещества от пространственной координаты и времени. Одномерный случай	23
1.2.1 Краевая задача без начальных условий	23
1.2.2 Краевая задача с начальными условиями (задача Коши).....	24
1.3 Аналитические решения уравнения диффузии с однородными граничными условиями.....	26
1.3.1 Решение уравнения диффузии с однородными граничными условиями методом разделения переменных	26
1.3.2 Решение уравнения диффузии с неоднородными граничными условиями методом разделения переменных	32
II Плазменно-пучковая обработка материалов.....	33
2.1 Азотирование металлов	33
2.1.1 Газовое азотирование	34
2.1.2 Каталитическое газовое азотирование	34
2.1.3 Ионно-плазменное азотирование.....	35
2.2 Формирования ионно-модифицированных слоев. Диаграмма фазовых состояний Fe-N	36
2.3. Азотирование стали.....	39

III Моделирование формирования ионно-модифицированных слоев железа с учетом распыления поверхности ионами пучка	41
3.1 Математическая модель формирования ионно-модифицированных слоев при азотировании железа	41
3.2 Численные расчеты формирования ионно-модифицированных слоев железа ионами азота	52
3.2.1 Влияние температуры азотирования	53
3.2.2 Влияние концентрации азота на границе образца	56
3.2.3 Влияние распыления поверхности ионами азота	60
IV Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение ...	61
4.1 Предпроектный анализ	61
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	61
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	62
4.2 SWOT-анализ	64
4.3 Инициация проекта	67
4.3.1 Цели и результат проекта	67
4.3.2 Организационная структура	68
4.4 Планирование управлением научно-техническим проектом	69
4.4.1 Структура работ в рамках научного исследования	69
4.5 Бюджет научно-технического исследования	72
4.5.1 Затраты на материалы	72
4.5.2 Социальное оборудование для научных работ	73
4.5.3 Основная заработная плата исполнителей темы	73

4.5.4 Отчисления во внебюджетные формы	76
4.5.5 Накладные расходы	77
4.5.6 Прочие затраты	78
4.6 Формирование бюджета научно-исследовательского проекта	78
4.7 Реестр рисков	79
4.8 Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	80
Вывод к разделу	83
V Социальная ответственность	84
5.1 Анализ опасных и вредных факторов	84
5.1.1 Воздействие магнитного поля и ионизирующего излучения	89
5.1.2 Электростатическое поле	90
5.1.3 Производственный шум и вибрации	90
5.1.4 Микроклимат в помещении	92
5.1.5 Освещенность рабочей зоны	94
5.1.6 Психофизические факторы	97
5.2 Электробезопасность	98
5.3 Экологичность разрабатываемой темы	101
5.4 Защита в чрезвычайных ситуациях	102
Вывод к разделу	105
Заключение	106
Список использованных источников	107
Приложение А	111

Введение

Азотирование является важной термохимической обработкой поверхности, которая используется для улучшения износостойкости, коррозионной стойкости, а также твёрдости стальных деталей. В зависимости от сорта стали, способа и условий обработки детали при облучении пучками низкоэнергетических ионов (1-3 кэВ) и ионно-плазменной обработке могут быть сформированы нитридные структуры на глубинах от нескольких десятков до нескольких сотен микрометров [1-4].

В Институте сильноточной электроники СО РАН (ИСЭ СО РАН) разрабатываются плазменные источники [5, 6], в Научной лаборатории высокоинтенсивной имплантации ионов Национально-исследовательского Томского политехнического университета (НЛ ВИИ НИ ТПУ) разрабатывается низкоэнергетический импульсно-периодический источник с плазменно-иммерсионным формированием и баллистической фокусировкой ионного пучка [7, 8]. Характеристики этих источников позволяют эффективно их использовать для целенаправленного изменения свойств поверхностных слоев материалов и изделий. Существует множество экспериментальных и теоретических работ. Однако, из-за сложности и многообразия процессов, протекающих при формировании пучков заряженных частиц и воздействия их на материалы, в настоящее время нет единой модели, описывающей эти процессы.

Теоретические методы исследований, в том числе моделирование является эффективным средством для установления основных закономерностей физических процессов и связи с его технологическими параметрами.

Целью дипломной работы является построение модели формирования ионно-модифицированных слоёв (фаз) железа, получение системы уравнений

для самосогласованной динамики слоев с учетом распыления поверхности, проведение численных расчетов.

Для достижения поставленной цели, необходимо решить следующие задачи:

1. Изучить методы насыщения металла азотом: газовое, плазменное, пучковое.
2. Рассмотреть теоретические модели формирования ионно-модифицированных слоёв при азотировании железа.
3. Построить диффузионную модель для самосогласованной динамики слоев с учетом распыления поверхности.
4. Провести вычисления и анализ результатов.

I. Нестационарное уравнение диффузии

1.1 Общее определение диффузии. Законы Фика

Диффузия называют процесс, при котором производится выравнивание концентрации частиц в произвольной среде. В случае присутствия градиента концентрации ∇C частиц в веществе образуется поток частиц J , который выравнивает их концентрации. Выразить связь между величиной потока и градиентом концентрации можно, используя первый закон Фика (1-ое уравнение Фика):

$$J = -D\nabla C \quad (1.1)$$

В выражении 1.1 D является коэффициентом диффузии. При направлении потока из области с большей концентрацией в область меньшей перед выражением ставят знак «минус».

Соотношение можно назвать справедливым в случаях, когда размер системы в направлении градиента является много больше длины свободного пробега частиц в среде при условии изменения концентрации на отрезке длины свободного пробега много меньшего характерного значения концентрации частиц C . Перечисленные условия справедливы только для веществ, являющихся консервативными. Помимо этого, полагается, что отсутствуют внешние поля, которые создают градиенты концентрации, давления, а также температуры.

Коэффициент диффузии D – это константа, зависящая от природы растворителя и растворенного вещества. Его размерность – $\text{м}^2/\text{с}$. В справочниках часто приводится D в $\text{см}^2/\text{с}$. Основным источником информации о коэффициентах диффузии в твердых телах, как и в жидкости, является эксперимент.

Температурная зависимость коэффициента диффузии хорошо описывается полуэмпирической формулой [9]:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (1.2)$$

Где:

D_0 – фактор диффузии, называемый также предэкспоненциальным множителем;

E – энергия активации,

R – постоянная Больцмана,

T – температура.

Для веществ, имеющих кристаллическую структуру, коэффициент диффузии является тензором, но этим, как правило, пренебрегают и используют усредненное значение.

Количество диффундирующего вещества можно считать постоянным, если отсутствуют источники и стоки (испарение, химическая реакция, фазовое превращение и т.д.); вещество при диффузии только перераспределяется.

Изменение концентрации диффундирующего вещества в пространстве и по времени описывает второе уравнение (второй закон) Фика. Оно формируется следующим образом.

По закону сохранения вещества, который гласит: изменение плотности (или концентрации) вещества в элементе объема происходит за счет втекания/вытекания вещества в этот элемент (уравнение непрерывности, входящее в систему уравнений сплошной среды), имеем:

$$\frac{\partial C(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}(\vec{r}, t) \quad (1.3)$$

Подставляя в уравнение (1.3) выражение (1.1), получим второе уравнение Фика с коэффициентом D , который зависит от координат:

$$\frac{\partial C(\vec{r}, t)}{\partial t} = \text{div}(D(\vec{r}) \cdot \nabla C(\vec{r}, t)) \quad (1.4a)$$

Если D не зависит от координат, то имеем:

$$\frac{\partial C(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla C(\vec{r}, t) \quad (1.46)$$

Можно различить несколько типов коэффициентов диффузии, всё будет зависеть от условий проведения опыта. Коэффициент диффузии определяется, как коэффициент пропорциональности между потоком и градиентом концентрации при этом, диффузионный поток, будет определяться по-разному. В этом разделе рассматривается диффузия в отсутствие внешних сил.

Имеем два вещества (A и B), неограниченно растворимых один в другом в твердом состоянии, при контакте которых происходит перемешивание вследствие взаимной диффузии обоих компонентов. Через j_i' , будем обозначать поток i -того компонента относительно неподвижного наблюдателя. Это может быть, например, поток, измерения для которого производились по отношению к краю образца, являющемуся неподвижным в системе координат лаборатории. В случае, когда диффузия проходит вдоль оси x , справедливо:

$$j_i' = -\tilde{D} \left(\frac{\partial C_i}{\partial x} \right)$$

где \tilde{D} — коэффициент взаимной диффузии.

Если плотность кристалла и его размер в процессе опыта не изменяются, то $j_A' = -j_B'$ и $dC_A/dx = -dC_B/dx$, тогда коэффициент взаимной диффузии, не зависимо от того входит ли в j_A' или в j_B' , будет одинаков. В этом случае величина \tilde{D} будет зависеть от взаимодействия между компонентами, а также от их подвижности. Поэтому коэффициент взаимной диффузии — является наиболее сложной для интерпретации диффузионной характеристикой.

Каждый компонент характеризуется собственным коэффициентом диффузии, совпадающий с коэффициентом взаимной диффузии, при условии, что собственные коэффициенты обоих компонентов равны между собой.

Иначе движение каждой плоскости решётки в диффузионной зоне (области взаимной диффузии) будет осуществляться в сторону компонента с большим собственным коэффициентом, относительно края образца (в лабораторной системе координат). Движение решётки будет представляться как целое.

В этом случае можно записать связь между потоками в неподвижной (лабораторной, j'_i) и движущейся (j_i) системах координат в виде

$$j'_i = j_i + C_i v_k$$

где v_k — скорость решетки.

Определим собственный коэффициент диффузии i -того компонента (D_i) через поток относительно движущегося наблюдателя:

$$j_i = -D_i \left(\frac{\partial C_i}{\partial x} \right) \quad (1.5)$$

Шымоном была предложена наглядная аналогия, в которой он рассмотрел ситуацию, описанную далее. Имеется текущая речка, на поверхность которой выливается пузырек с чернилами. Чернила начинают расплываться, соответственно пятно начинает сносить течение. Тем временем есть два наблюдателя, один находится на берегу, другой в лодке, которая плывёт по течению, каждый из них зафиксирует различную скорость расплывания чернильного пятна. Наблюдать в лодке, плывущей по течению, составит правильное представление о собственной диффузии чернил.

В отсутствие внешних сил, если $D_A = D_B$, то $v_k = 0$. Тогда $\tilde{D} = D_A = D_B$.

Собственный коэффициент диффузии также можно назвать сложной характеристикой. Он передает подвижность компонента в более явном виде, чем коэффициент взаимной диффузии, однако зависит и от взаимодействия компонентов.

Собственные коэффициенты, так же, как и коэффициент взаимной диффузии, зависят от структуры сплава из-за корректировки окружения диффундирующего атома и, следовательно, силового поля, в котором происходит его движение (случай, когда рассматривается совершенный раствор является исключением). Поэтому они относятся к определенному составу твердого раствора. Концентрационную зависимость всех коэффициентов: \tilde{D} , D_A и D_B , позволяет определить правильно поставленный опыт по взаимной диффузии.

Подвижность i -того компонента, помимо собственных коэффициентов, также характеризуется коэффициентами диффузии, называемыми парциальными (D_{ik}), и определяемыми выражением:

$$j_i = -\sum_k D_{ik} \left(\frac{\partial C_k}{\partial x} \right) \quad (1.6)$$

Как известно, парциальные коэффициенты определяются как для взаимной, так и для собственной диффузии; если определить, как в последнем случае, то их необходимо вводить через поток j'_i , который находится в неподвижной системе координат.

Из (1.6) следует, что надо различать диагональные парциальные коэффициенты (D_{ii}), от перекрестных парциальных коэффициентов (D_{ik}).

Диагональные парциальные коэффициенты (D_{ii}) отражают влияние «своего» градиента концентрации на поток i -того компонента.

Перекрестные парциальные коэффициенты (D_{ik}) отражают влияние «чужих» градиентов (dc_k/dx) на поток i -того компонента.

С помощью выражений (1.5) и (1.6) установим связь между собственными и парциальными коэффициентами:

$$D_i = D_{ii} + \sum_{k \neq i} D_{ik} \left(\frac{\partial C_k / \partial x}{\partial C_i / \partial x} \right)$$

В бинарной системе $dC_A/dx = -dC_B/dx$ и $D_A = D_{AA} - D_{AB}$.

Чаще всего собственные коэффициенты мало отличаются от парциальных, так как, если все D_{ik} малы, то $D_i = D_{ii}$.

До этого момента все введенные значения являлись коэффициентами гетеродиффузии (химическими коэффициентами диффузии).

Рассмотрим более простой для интерпретации случай, при котором отсутствует градиент концентрации ($\nabla c_i = 0$), а присутствует исключительно градиент изотопной концентрации и концентрации радиоактивных атомов (C_i^*).

Тогда справедливо равенство:

$$j_i = -D_i^* \frac{\partial C_i^*}{\partial x}$$

где D_i^* — коэффициент изотопной диффузии. Так как движение радиоактивных атомов происходит в практически постоянном силовом поле, эта характеристику будет проще интерпретировать. Если радиоактивные и неактивные атомы того же сорта, то D_i^* — коэффициент самодиффузии. Поскольку самодиффузия является процессом выравнивания изотопного состава, можно использовать термин «коэффициент самодиффузии» также при выравнивании изотопного состава. При этом самодиффузия в сплаве отличается от самодиффузии в чистом веществе [9, 10].

Существуют два вида уравнения диффузии: *стационарное* и *нестационарное*.

Стационарное уравнение. При условии, что дискриминируется задача по определению температуры (в качестве примера выступает распределение источников, не зависящих от времени) или установившегося распределения плотности. В таком случае, из нестационарного уравнения исключаются члены, связанные с временем. Исходя из вышесказанного, располагаем

уравнением теплопроводности в стационарном виде, которое относится к уравнениям эллиптического класса, определяемых выражением:

$$-(\nabla, D\nabla C(\vec{r})) = f(\vec{r}).$$

1.1.1 Нестационарное уравнение диффузии

Нестационарное уравнение диффузии, рассматриваемое в данном разделе, относят к дифференциальным уравнениям параболического класса. Уравнения описывают распространение растворяемого вещества в следствие теплопроводности из-за диффузии или перераспределения температуры тела [10].

а) Одномерный случай

В одномерном случае, при наличии одной координаты x , уравнение диффузии с коэффициентом D описывается выражением:

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial}{\partial x} C(x, t) + f(x, t),$$

при заданной функции $f(x, t)$.

При неизменном коэффициенте теплопроводности D уравнение приобретает вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x, t) + f(x, t).$$

где функция $C(x, t)$ описывает концентрацию диффундирующего вещества, а $f(x, t)$ – источники тепла.

б) Трёхмерный случай

Трёхмерный случай описывается уравнением:

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\vec{r}, t) = (\nabla, D \nabla C(\vec{r}, t)) + f(x, t),$$

а при $D = \text{const}$ приобретает вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\vec{r}, t) = D \Delta C(\vec{r}, t) + f(x, t)$$

где

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \text{ — оператор Лапласа.}$$

в) Решение нестационарного уравнения диффузии в одномерном случае

Рассматриваемое однородное уравнение, решением которого при начальном условии $C(x, 0) = \delta(x)$ (как можно заметить, определено дельта-функцией) и граничном условии $C(\infty, t) = 0$ имеет вид:

$$C(x, t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Dt}}.$$

В таком случае, функцию $C(x, t)$ можно интерпретировать как плотность вероятности нахождения частицы в момент времени $t=0$ в начальном пункте, переходящем через время t в пункт, с координатой x . Тогда, как известно, средний квадрат пройденного пути вычисляется используя выражение:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 C(x, t) dx = 2Dt.$$

Описанному выше закону, относящемуся к параболическому классу, подчиняется рост окисных пленок на поверхности металла при условии воздействия высокой температуры. Для обеспечения процесса требуется достаточное количество кислорода в окружающей среде.

Для произвольного распределения при $t=0$ $C(x, 0)$ общее решение диффузионного уравнения представляется свёрткой:

$$C(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x',0) \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \cdot \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right) dx'.$$

Частные замечания

Так как вывод диффузионного уравнения и уравнения теплопроводности основывается на классической физике, то в них отсутствует учёта, как квантовых, так и релятивистских эффектов. Последнее следует из фундаментального решения уравнения, исходя из которого вещество мгновенно распространяется на сколь угодно большие расстояния.

1.2 Постановка краевых задач о зависимости концентрации вещества от пространственной координаты и времени. Одномерный случай

1.2.1 Краевая задача без начальных условий

Известно, что можно пренебречь начальными условиями при условии, если разница между рассматриваемым и начальным моментом времени велика. Обуславливается это тем, что влияние начальных условий с течением времени ослабевает. Учитывая вышеописанное, логично произвести переход к задаче, для которой заданы краевые условия, но отсутствуют начальные.

Задачей является поиск решения диффузионного уравнения на интервале $[0, l]$:

$$\begin{cases} 0 \leq x \leq l \\ -\infty < t \end{cases},$$

удовлетворяющее условиям:

$$\begin{cases} u(0,t) = \mu_1(t) \\ u(l,t) = \mu_2(t) \end{cases},$$

где

$u(x, t)$ – концентрация частиц в среде.

$\mu_1(t)$ и $\mu_2(t)$ — заданные функции.

l – длина стержня.

1.2.2 Краевая задача с начальными условиями (задача Коши)

а) Краевая задача для бесконечного стержня

Если рассматривать процесс диффузии, происходящий в бесконечно длинном стержне, то концентрация для какого-то единичного рассматриваемого участка стержня будет зависеть исключительно от ее начального распределения. Объясняется это тем, что влияние концентрации за короткий промежуток времени стремится к нулю.

Задачей является поиск решения диффузионного уравнения на интервале

$$\begin{cases} -\infty \leq x \leq \infty \\ t \geq t_0 \end{cases},$$

учитывая, что $u(x, t_0) = \varphi(x)$ ($-\infty \leq x \leq \infty$), где $\varphi(x)$ — заданная функция.

б) Краевая задача для полубесконечного стержня

Если рассматривать процесс диффузии, происходящий вблизи одного конца стержня и бесконечно далёк от другого, то необходимо переходить к краевой задаче, учитывая влияние только одного краевого условия.

Задачей является поиск решения диффузионного уравнения на интервале:

$$\begin{cases} 0 \leq x \leq \infty \\ t \geq t_0 \end{cases},$$

удовлетворяющее равенствам:

$$\begin{cases} u(x, t_0) = \varphi(x) \\ u(0, t) = \mu(t) \end{cases},$$

где $\varphi(x)$ и $\mu(t)$ — заданные функции.

в) *Краевая задача для ограниченного стержня.*

В данном пункте рассмотрим краевую задачу на интервале $\begin{cases} 0 < x < l \\ 0 < t \leq T \end{cases}$,

имея уравнение диффузии вида:

$$u_t = a^2 u_{xx} + f(x, t).$$

Как известно, уравнение называют *однородным*, если выполняется условие $f(x, t) = 0$, иначе уравнение является *неоднородным*.

Учитывая начальные условия $u(x, 0) = \varphi(x)$ ($0 \leq x \leq l$), $t = 0$, концентрация в точке x определяется функцией $\varphi(x)$.

$$\begin{cases} u(0, t) = \mu_1(t) \\ u(l, t) = \mu_2(t) \end{cases}, \quad 0 \leq t \leq T - \text{краевые условия.}$$

Для момента времени t концентрация в граничных точках определяется, используя функции $\mu_1(t)$ и $\mu_2(t)$.

В зависимости от рассматриваемых краевых условий задачи для уравнения диффузии можно разделить на три типа. Произведем разбор общего случая при $\alpha_i^2 + \beta_i^2 \neq 0$, ($i = 1, 2$).

$$\begin{cases} \alpha_1 u_x(0, t) + \beta_1 u(0, t) = \mu_1(t) \\ \alpha_2 u_x(l, t) + \beta_2 u(l, t) = \mu_2(t) \end{cases}.$$

Условие является условием первого рода в случае, если $\alpha_i = 0$, при $i = 1, 2$.

Условие является условием второго рода в случае, если $\beta_i=0$, при $i=1,2$.

В случае, когда α_i и β_i не равны нулю, условие является условием третьего рода.

Учитывая вышесказанное, были получены три краевые задачи для уравнения диффузии.

1.3 Аналитические решения уравнения диффузии с однородными граничными условиями.

1.3.1 Решение уравнения диффузии с однородными граничными условиями методом разделения переменных

1.3.1.1) Однородное уравнение диффузии с однородными граничными условиями

Имеем условия:

$$u_t = a^2 u_{xx}, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq T$$

$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad 0 \leq x \leq 1$$

$$\begin{cases} u(0, t) = 0 \\ u(1, t) = 0 \end{cases}; \quad 0 \leq t \leq T$$

Требуется определить функцию $u(x, t)$ для $\forall (x, t): \begin{cases} 0 \leq x \leq 1 \\ 0 \leq t \leq T \end{cases}$.

Функция $u(x, t)$ представляется в виде произведения, как:

$$u(x, t) = X(x)T(t).$$

Далее, подставив предполагаемую форму решения в исходное уравнение, получим

$$X(x)T'(t) = a^2 X''(x)T(t).$$

Произведя деление выражения на $a^2 X(x)T(t)$, было получено:

$$\frac{1}{a^2} \frac{T'(t)}{T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda, \lambda = \text{const.}$$

Анализируя полученное уравнение видно, что в левой части расположена функция, зависящая от x , в правой – от t . Если взять постоянное значение x в правой части уравнения, то независимо от t значение левой части уравнения остается неизменным. Также несложно убедиться, что правая часть уравнения является постоянной и равна константе $-\lambda$. Исходя из этого, получаем систему обыкновенных линейных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} X''(x) + \lambda X(x) = 0 \\ T'(t) + a^2 \lambda T(t) = 0 \end{cases}$$

При учете граничных условий рассматриваемой задачи:

$$\begin{cases} u(0, t) = X(0)T(t) = 0 \\ u(l, t) = X(l)T(t) = 0 \end{cases},$$

при $X(0) = X(l) = 0$ ($T(t) \neq 0$), исключительно для нетривиального решения.

Получив граничные условия, производится переход к задаче Штурма-Лиувилля:

$$\begin{cases} X''(x) + \lambda X(x) = 0 \\ X(0) = 0 \\ X(l) = 0 \end{cases}$$

Представленная задача заключается в решении линейного дифференциального уравнения и рассмотрению трех случаев случаев:

1.1. $\lambda < 0$

Для $\lambda < 0$ общий вид решения:

$$X(x) = C_1 e^{\sqrt{-\lambda}x} + C_2 e^{-\sqrt{-\lambda}x}$$

Произведя подстановку граничных условий, очевидно, что решение $X(x) \equiv 0$. По условию задачи производится поиск нетривиального решения, поэтому данный случай не является корректным.

$$1.2. \lambda = 0$$

Для $\lambda = 0$ общий вид решения:

$$X(x) = C_1 x + C_2$$

Несложно догадаться, что данный случай также не удовлетворяет требованиям задачи.

$$1.3. \lambda > 0$$

Для $\lambda > 0$ общий вид решения:

$$X(x) = C_1 \cos(\sqrt{\lambda}x) + C_2 \sin(\sqrt{\lambda}x)$$

при граничных условиях:

$$X(0) = C_1 = 0$$

$$X(l) = C_2 \sin(\sqrt{\lambda}l)$$

Так как по условию задачи производится поиск исключительно нетривиальных решений, то при $C_2=0$ требования не удовлетворяются, следовательно

$$\begin{aligned} \sin(\sqrt{\lambda}l) &= 0 \\ \sqrt{\lambda}l &= \pi n, n = 1, 2, \dots \\ \lambda_n &= \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Отсюда: $X_n(x) = C_n \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right), n = 1, 2, \dots$

Учитывая найденные λ , общее решение уравнения примет вид:

$$T(t) + a^2 \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 T(t) = 0$$

Предполагаемое решение представленного дифференциального уравнения примет вид:

$$T_n(t) = D_n e^{-a^2 \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t}, D_n = \text{const.}$$

Учитывая вышеперечисленное, решение исходной задачи примет вид:

$$u(x, t) = X_n(x) T_n(t) = C_n \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) e^{-a^2 \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t}, n = 1, 2, \dots$$

Результатом является определение бесконечно много частных решений, являющихся линейно-независимыми. Линейная комбинация любого количества решений равна нулю, только если все коэффициенты при них равны нулю. Исходя из этого, произведя сложение всех частных решений для $n \in [1; \infty]$, получаем общее решения для исходной задачи.

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) e^{-a^2 \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t}$$

Заключительным этапом является определение значения константы C_n из начального условия:

$$u(x, 0) = \varphi(x)$$

Для определения значения C_n необходимо произвести разложение $\varphi(x)$ в ряд Фурье:

$$\varphi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$$

$$A_n = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(\xi) \sin\left(\frac{\pi n}{l} \xi\right) d\xi$$

Разложив, получаем:

$$u(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$$

$$C_n = A_n = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(\xi) \sin\left(\frac{\pi n}{l} \xi\right) d\xi$$

Общим решением для задачи является:

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{l} \int_0^l \varphi(\xi) \sin\left(\frac{\pi n}{l} \xi\right) d\xi \right) \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) e^{-a^2 \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t}$$

Исходя из курса математической физики, полученный в ходе решения ряд, удовлетворяет всем условиям поставленной задачи. Полученная функция обладает такими свойствами как: непрерывность в точках границ на всей области, где она определена, и дифференцируемость (полученный ряд сходится равномерно).

1.3.1.2) Неоднородное уравнение диффузии с однородными граничными условиями

Имеем условия:

$$u_t = a^2 u_{xx} + f(x,t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < t < T$$

$$u(x,0) = 0, \quad 0 \leq x \leq l$$

$$\begin{cases} u(0,t) = 0 \\ u(l,t) = 0 \end{cases}, \quad 0 \leq t \leq T$$

Пусть

$$\begin{aligned}
u_n(x, t) &= X_n(x)T_n(t) \\
f_n(x, t) &= X_n(x)F_n(t) \\
X_n(x) &= \sin\left(\frac{\pi n}{l}x\right)
\end{aligned}$$

Используя соотношение $X''_n(x) = -\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 X_n(x)$, перепишем исходное уравнение:

$$\begin{aligned}
X_n(x)T'_n(t) &= -a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 X_n(x)T_n(t) + X_n(x)F_n(t) \\
T'_n(t) &= -a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 T_n(t) + F_n(t)
\end{aligned}$$

Пользуясь методом вариации постоянной, найдем решение последнего уравнения. Сперва определим общее решение:

$$\begin{aligned}
T'_n(t) &= -a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 T_n(t) \\
T_n(t) &= De^{-a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t}
\end{aligned}$$

Затем произведем замену коэффициента D на переменную, зависящую от времени $D(t)$, получим:

$$\begin{aligned}
T_n(t) &= D(t)e^{-a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} \\
D'_n(t)e^{-a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} - a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 e^{-a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} D_n(t) &= -a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 e^{-a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} D_n(t) + F_n(t) \\
D'_n(t)e^{-a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} &= F_n(t) \\
D_n(t) &= \int F_n(t)e^{a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} dt \\
T_n(t) &= A_n e^{-a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} + e^{-a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} \int F_n(t)e^{a^2\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t} dt
\end{aligned}$$

Используя начальное условие, имеем: $u_n(x, 0) = X_n(x)T_n(0) = 0, T_n(0) = 0$

Учитывая ограничения T , имеем:

$$T_n(t) = \int_0^t e^{-a^2 \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 (t-\tau)} F_n(\tau) d\tau$$

Так как $f_n(x, t) = X_n(x) F_n(t) = \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) F_n(t)$, то $F_n(t)$ – коэффициент ряда Фурье.

$F_n(t)$ определяется как:

$$F_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^l f(\xi, t) \sin\left(\frac{\pi n}{l} \xi\right) d\xi$$

Тогда функция $u(x, t)$ примет вид:

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} X_n(x) T_n(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_0^t e^{-a^2 \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 (t-\tau)} \left\{ \frac{2}{l} \int_0^l f(\xi, \tau) \sin\left(\frac{\pi n}{l} \xi\right) d\xi \right\} d\tau \right] \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right)$$

1.3.2 Решение уравнения диффузии с неоднородными граничными условиями методом разделения переменных

Обычно есть возможность решить уравнение теплопроводности с неоднородными начальными и краевыми условиями

$$\begin{aligned} u_t &= a^2 u_{xx} + f(x, t) \\ u(x, 0) &= \varphi(x) \\ u(0, t) &= \mu_1(t) \\ u(l, t) &= \mu_2(t) \end{aligned}$$

Воспользовавшись описанными в предыдущих пунктах методами, представим функцию $u(x, t)$ как сумму:

$$\begin{aligned}
u(x, t) &= \tilde{u}(x, t) + U(x, t) \\
\tilde{u}(x, 0) &= u(x, 0) - U(x, 0) = \varphi(x) - U(x, 0) \\
\tilde{u}(0, t) &= 0 \\
\tilde{u}(l, t) &= 0
\end{aligned}$$

Тогда $U(x, t)$:

$$\begin{aligned}
U(x, t) &= Ax + b \\
U(0, t) &= b = \mu_1(t) \\
U(l, t) &= Al + \mu_1 = \mu_2 \Rightarrow A = \frac{\mu_2(t) - \mu_1(t)}{l} \\
U(x, t) &= \frac{\mu_2(t) - \mu_1(t)}{l} x + \mu_1(t)
\end{aligned}$$

Первоначальная задача свелась к задаче вида:

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_t &= a^2 \tilde{u}_{xx} + f(x, t) - \frac{\mu'_2(t) - \mu'_1(t)}{l} x - \mu'_1(t) \\
\tilde{u}(x, 0) &= \varphi(x) - \frac{\mu_2(0) - \mu_1(0)}{l} x - \mu_1(0) \\
\tilde{u}(0, t) &= 0 \\
\tilde{u}(l, t) &= 0
\end{aligned}$$

Функция $u(x, t)$ будет определяться по формуле:

$$u(x, t) = \tilde{u}(x, t) + \frac{\mu_2 - \mu_1}{l} x + \mu_1$$

Таким образом, получено решение уравнения диффузии с неоднородными граничными условиями методом разделения переменных.

II. Плазменно-пучковая обработка материалов

2.1 Азотирование металлов (газовое, плазменное, пучковое)

Азотированием (азотизацией или нитрированием) металлов называется процесс поверхностного насыщения металла азотом.

Для улучшения свойств деталей, которые работают в условиях знакопеременных нагрузок и работают на износ применяют процесс азотирования или цементации. Произведя азотирование деталь получает следующие характеристики: высокую твердость, теплостойкость, коррозионная стойкость и износостойкость. Как известно, азотированию подвергаются в основном легированные стали определенных составов. Процесс азотирования занимает достаточно длительный промежуток времени, который составляет в среднем от 30 до 60 часов. Исходя из всего перечисленного, применение данного процесса для улучшения свойств материалов целесообразно исключительно для ответственных деталей, таких как: детали авиамоторов, турбин и т.п. [1-4].

2.1.1 Газовое азотирование

Для более продуктивного насыщения верхних слоев металла процесс производится при температурах от 400 до 1200 °С в зависимости от типа стали. В качестве среды для насыщения выступает диссоциированный аммиак (NH_3). В момент контакта аммиака с нагретой поверхностью стали, первый распадается на водород и азот. Для ускорения процесса распада используются всевозможные катализаторы. Диффундируя на поверхность металла, азот создает слой нитрида. В зависимости от необходимых механических свойств получаемого слоя, при азотировании газом применяют:

- двухступенчатые, трёхступенчатые температурные режимы насыщения;
- разбавление диссоциированного аммиака воздухом или водородом.

2.1.2 Каталитическое газовое азотирование

Каталитическое газовое азотирование является модификацией технологии азотирования газом. Для насыщения выступает аммиачная среда, распадающаяся при температурах от 400 до 600 °С на катализаторе в рабочем пространстве печи. Для контроля механических характеристик и структуры слоя применяется изменение потенциала насыщения. По сравнению с обычным газовым азотированием, применяются значительно низкие температуры.

2.1.3 Ионно-плазменное азотирование

Ионно-плазменное азотирование заключается в насыщении металлических деталей в среде, состоящей из азотосодержащего вакуума с давлением порядка 0,01 атм. Одновременно в среде возбуждается тлеющий электрический разряд. В качестве анода выступают стенки технологической камеры, катодом является сама деталь [5, 6, 11].

Плазму азота, для поддержания технологического процесса, формируют в прикатодной области. Генерация производится с помощью пучка электронов, выстреливаемых из электронной пушки в сторону анода и вспомогательного анода. Вследствие этого возникает газовый поток, в котором, из-за столкновения нейтральных частиц с электронами генерируется плазма. Управление скоростью движения электронов осуществляют по средствам вспомогательного анода. Для обеспечения заданных прочностных и механических характеристик изделия применяют техники:

- изменение степени разряжения;
- изменение плотности тока;
- добавки к азоту особо чистых технологических газов (водород, аргон, метан, кислород);

- изменение расхода азота.

На рисунке 2.1 представлена схема реализации способа вакуумного ионно-плазменного азотирования изделий из стали.

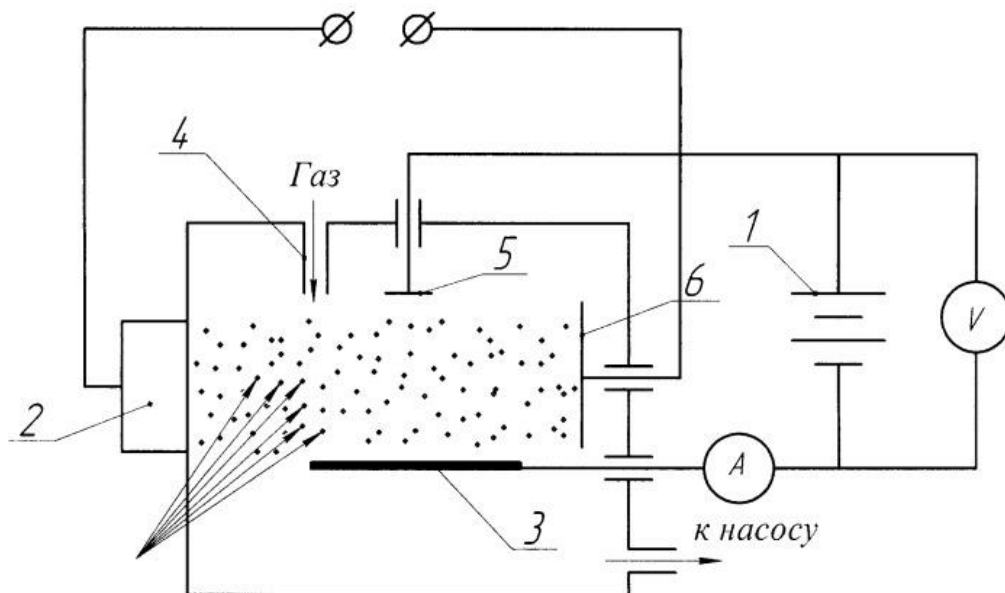


Рисунок 2.1 – Схема реализации способа вакуумного ионно-плазменного азотирования: 1-источник питания, 2-электронную пушку, 3-катод-деталь, 4-устройство подачи рабочего газа, 5-анод, 6-вспомогательный анод [11]

2.2 Формирования ионно-модифицированных слоев. Диаграмма фазовых состояний Fe-N

Растворимость азота в железе при комнатной температуре очень ограничена и достигает максимума 0,4 ат.% (0,1 мас.%) при 592 ° С. В процессе азотирования железа, когда концентрация азота превышает предел растворимости, дополнительные атомы азота образуют стехиометрические соединения с атомами железа, следовательно, выделяя промежуточные нитриды железа. Состав поверхности азотированного железа можно предсказать, рассматривая бинарную фазовую диаграмму *Fe-N*. Основываясь на этой диаграмме [11], в процессе азотирования теоретически могут

образовываться несколько фаз и соединений, включая альфа (α), гамма (γ), гамма простой (γ'), эpsilon (ϵ), дзета (ζ) и т. Д.

Фазовая диаграмма – это графическое описание составов и относительных количеств фаз в зависимости от химического состава и от внешних условий.

К внешним условиям обычно относят такие параметры среды, как: температуру, давление, гравитация, напряженность магнитного поля, химический потенциал вполне подвижного компонента и т. п. Для наиболее удобного представления взаимодействия химических элементов в зависимости от температуры в материаловедении обычно используют фазовые диаграммы. Фазовые диаграммы также называют двухкомпонентными T - x фазовыми диаграммами или двухкомпонентными фазовыми диаграммами.

Взаимодействие железа с азотом в зависимости от времени из-за широкого практического применения в процессах азотирования получило важное практическое значение. На рисунке 2.2 представлена диаграмма состояния системы $Fe-N$.

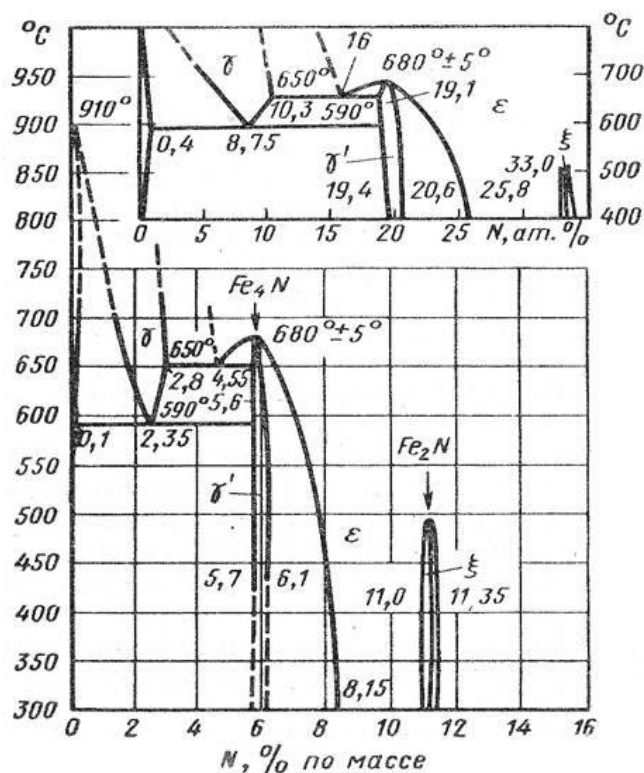


Рисунок 2.2 – Диаграмма фазовых состояний системы $Fe-N$ [11]

При увеличении температуры азотирования концентрация азота также растет. На границе $\alpha \rightarrow \gamma$ (906 °C) концентрация азота скачкообразно изменяется, при дальнейшем росте температуры до границы $\gamma \rightarrow \delta$ (1402 °C) она уменьшается.

При концентрации азота 9,9% образуется соединение Fe_4N , а при концентрации равной 11,5% Fe_2N . При температуре ~550 °C Fe_2N начинает разлагаться. При дальнейшем повышении температуры начинает диссоциировать и Fe_4N .

Фаза α - твердый раствор внедрения азота в О.Ц.К. α - Fe . Растворимость азота в α - Fe при 590 °C незначительна и составляет 0,1 % (по массе), или 0,4 % (ат.) N , поэтому период решетки этого раствора практически совпадает с периодом решетки α - Fe .

Фаза γ - твердый раствор внедрения азота в г. ц. к. γ - Fe , изоморфный аустениту в системе $Fe-C$. Период решетки γ - фазы при увеличении содержания азота увеличивается с 0,3637 нм (γ - Fe 910 °C) до 0,3646 нм при содержании 8.67 % (ат.), или 2,33 % (по массе) N .

Фаза γ' имеет г. ц. к. структуру с атомом азота, расположенным в центре ячейки. В узкой области гомогенности период решетки фазы изменяется от 0,3791 до 0,3801 нм. Область гомогенности γ' -фазы при 500 °C расположена в интервале 19,6...19,95 % (ат.) N .

Фаза ϵ имеет Г.П.У. решетку с упорядоченным расположением атомов азота. С увеличением содержания азота от 19,42 % (ат.), или 5,7 % (по массе), до 33,02 % (ат.), или 11,0 % (по массе), периоды решетки изменяются от $a = 0,2660$ нм; $c = 0,4343$ нм; $c/a - 1,633$ до $a = 0,276$ нм; $c = 0,4420$ нм; $c/a - 1,599$.

Область гомогенности ε -фазы при 20 °C составляет 26,0...33,2 % (ат.), или 8,1...11,1 % (по массе) N .

2.3 Азотирование стали

В экспериментах, проведенных в работах [5,6], плазма формируется в полом цилиндрическом катоде, внутри которого располагается деталь (детали). Во время обработки деталь служит катодом, между плазмой и деталью формируется слой пространственного заряда, в электрическом поле которого ускоряются ионы плазмы. Благодаря ионной бомбардировке осуществляется нагрев деталей и процесс азотирования.

Анализ экспериментальных результатов [6] показывает, что азотирование стали 4140 в атмосфере чистого азота в течение 2 часов приводит к увеличению микротвердости на поверхности и по глубине образца (более чем в 3 раза), формируется нитридный слой (Fe_4N), который имеет толщину 4...10 мкм в зависимости от состава газовой смеси.

На рисунке 2.3 показаны экспериментальные зависимости распределения азота в стали 4140 (состав: $Fe \sim 96\%$, $Cr \sim 0.75...1\%$, $Mn \sim 0.75...1\%$, $C \sim 0.38...0.43\%$, ...), здесь же показаны расчетные зависимости [12] при $T = 500^\circ C$, полученные для железа и для стали с учетом того, что в ней помимо железа содержатся примеси, которые влияют на коэффициенты диффузии азота и концентрацию фазы насыщенного α -раствора C_α . Кроме того, формирование устойчивых соединений азота с примесями приводит к размытию фазовых границ. Результаты модели [12] согласуются с результатами других авторов [13] и экспериментом [6].

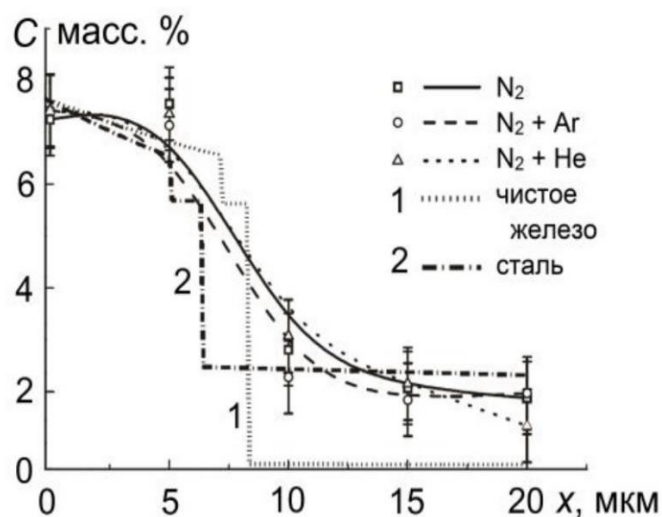


Рисунок 2.3 Экспериментальные [6] и численные распределения азота в чистом железе (1) и стали (2) [12]

Азотирование стали 4140 в плазме несамостоятельного тлеющего разряда с полным катодом приводит к образованию многослойной структуры с твердостью 10...12 ГПа на поверхности и резко спадающей до 2.5 ГПа (исходная микротвердость) на глубине 150 мкм [6]. Поверхностный слой (рисунок 2.3) включает в себе нитридные фазы $Fe_{2-3}N$ и Fe_4N .

В работе [5] показано, что методы плазменного азотирования сталей 40X (состав: $Fe \sim 97\%$, $Cr \sim 0.8...1.1\%$, $Mn \sim 0.5...0.8\%$, $C \sim 0.36...0.44\%$, ...) при температуре обработки $\sim 520^\circ C$ позволяют получать модифицированные слои глубиной до нескольких сотен микрон за 2...4 часа. Микротвёрдость поверхностного слоя 9 ГПа. При параметрах эксперимента (энергия ионов 400...250 эВ, плотность ионного тока 1...5 мА/см²) распыление поверхности не является существенным по сравнению с шириной модифицированного слоя.

В эксперименте [7, 8] высокоинтенсивное воздействие на сталь 40X пучка ионов азота с энергией 1.2 кэВ характеризуется значительным ионным распылением поверхности обрабатываемой мишени при плотности тока 10-500 мА/см². После 80 мин обработки (с учетом предварительного нагрева

мишени ионным пучком в течение (~ 20 мин)) на поверхности образца из стали 40Х сформирован кратер с максимальной глубиной в центре, максимальная глубина которого совпадает с максимумом распределения плотности тока ионного пучка (рисунок 2.4) [8].

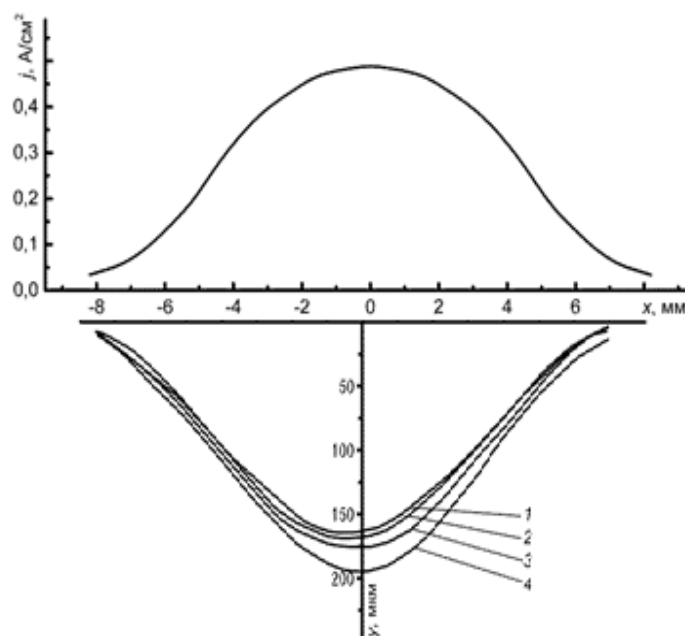


Рисунок 2.4 Распределение плотности ионного тока (j) по сечению ионного пучка азота и сечение поверхности модифицированных образцов в области максимальной глубины кратера после ионного распыления при различных температурах процесса:

1 – 450°C; 2 – 500°C; 3 – 580°C; 4 – 650°C [8]

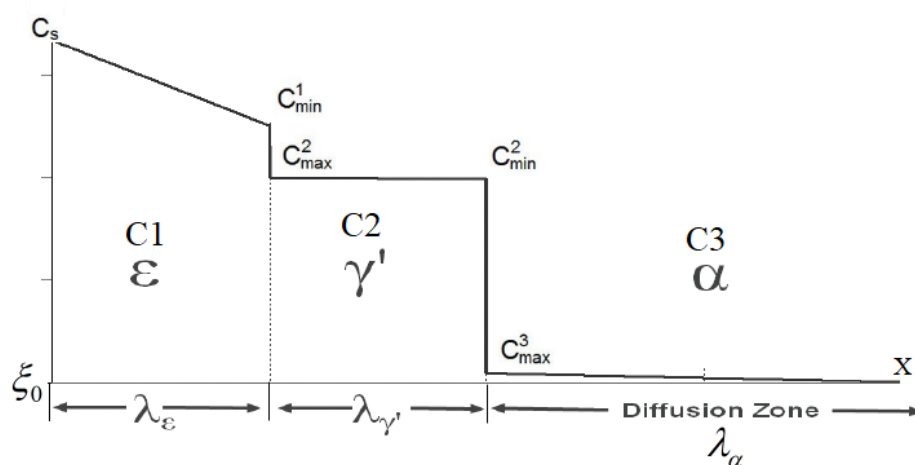
Максимальная плотность ионного тока 0.5 A/cm^2 на образце на оси симметрии пучка при ионном токе 0.6 A . Конфигурация кратера и распределение плотности тока коррелируют между собой.

3 Моделирование формирования ионно-модифицированных слоев железа

3.1 Математическая модель формирования ионно-модифицированных слоев при азотировании железа

Поскольку потенциал азота на поверхности компонентов обычно не превышает 10 мас.%, Некоторые фазы, присутствующие на диаграмме равновесия, например, ζ и богатые азотом соединения, не могут образовываться в процессе азотирования. Следовательно, структура поверхности азотированного железа обычно включает зону диффузии α -Fe(N) (твёрдый раствор азота в α -Fe), слои слоев γ' и ε . γ' - нитридная фаза представляет собой промежуточное соединение со стехиометрией, близкой к Fe_4N с азотом 20 ат.% (5,9 мас.%). Нитрид ε представляет собой промежуточную фазу, которая образуется в диапазоне концентраций азота, таким образом, он обычно демонстрируется как $Fe_{2-3}N$. Теоретически максимальная растворимость азота в ε -фазе составляет около 33 ат.% (11 мас.%), но в соответствии с активностью азота в реальном процессе азотирования концентрация азота в фазе ε -нитрида обычно не превышает 9 мас.%. Концентрация азота в слоях ε и γ' , а также в зоне α -диффузии схематически показана на рисунке 3.1.

Диффузионная задача формулируется для образца, который для процесса диффузии может рассматриваться, как бесконечно большой в математическом смысле. Геометрия модели в общем виде состоит из n слоев и диффузионной зоны. На рисунке 3.1 представлено изменение концентрации диффундирующего элемента по глубине.



Распределение концентрации $C_i(x,t)$ диффундирующего элемента на глубине x в момент времени t в каждом слое (фазе) i ($i = 1, 2$) и диффузионной зоне определяется из решения уравнения диффузии:

$$\frac{\partial C_i(x,t)}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i(x,t)}{\partial x^2}, \quad i = \varepsilon, \gamma, \alpha$$

при выполнении условия сохранения масс (условие Стефана) на границах между слоями:

$$\frac{d\lambda_\varepsilon}{dt} = \frac{[J_\varepsilon - J_\gamma]_{\lambda_\varepsilon}}{C_{\min}^1 - C_{\max}^2} - v$$

$$\frac{d(\lambda_\varepsilon + \lambda_\gamma)}{dt} = \frac{[J_\gamma - J_\alpha]_{\lambda_\gamma}}{C_{\min}^2 - C_{\max}^3} - v$$

и удовлетворяющее начальным $C(x,0) = 0$ и граничным условиям:

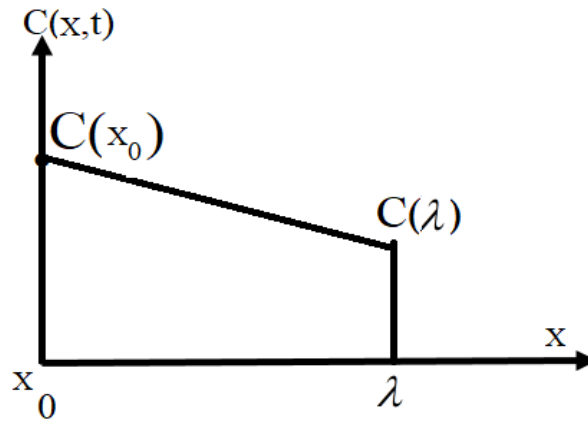
$$\begin{aligned} C(x = \xi_0, t) &= C_s; \\ C(x = \xi_0 + \lambda_\varepsilon, t) &= C_{\max}^2; \\ C(x = \xi_0 + \lambda_\varepsilon + \lambda_{\gamma'}, t) &= C_{\min}^2 \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} C(x = \xi_0 + \lambda_\varepsilon, t) &= C_{\min}^1; \\ C(x = \xi_0 + \lambda_\varepsilon + \lambda_{\gamma'}, t) &= C_{\min}^2 \end{aligned} \quad (3.3)$$

Здесь $v = d\beta_0/dt$ – скорость распыления поверхности ионами.

Коэффициенты диффузии азота D_ε , D_γ и D_α в каждой фазе считаются постоянными.

1. Рассмотрим ε - слой:



для ε -слоя, $\xi_0 \rightarrow x_0$ (обозначения)

$\xi_0 + \lambda_\varepsilon \rightarrow \lambda$ или λ_ε (обозначения)

Общее решение задачи вынужденной диффузии (3.1) из постоянного источника для тела конечных размеров со связывающими границами (для слоев $i = 1, \dots, n$) имеет вид:

$$C(x,t) - C_{x_0} = A \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right), \quad (3.4)$$

где $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ - функция ошибки (интеграл от вероятности).

Подставляя начальные (3.2) и граничные условия (3.3) в уравнение (3.4), получим:

$$x = 0 : C(0,t) = C_{x_0}$$

$$x = \lambda : C(\lambda,t) - C_{x_0} = A \operatorname{erf} \left(\frac{\lambda}{2\sqrt{Dt}} \right)$$

$$\Delta C = C(x,t) - C_{y_0} = \frac{C(\lambda,t) - C_{x_0}}{\operatorname{erf} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{4Dt}} \right)} \cdot \operatorname{erf} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{4Dt}} \right)$$

$$C(x,t) = C_0 + \Delta C(x,t).$$

Обозначим:

$$\Delta C_1^i = C_{\max}^i - C_{\min}^i; \quad \Delta C_{12} = C_{\min}^1 - C_{\max}^2; \quad \Delta C_{23} = C_{\min}^2 - C_{\max}^3;$$

$$\frac{d\lambda_\varepsilon}{dt} = \frac{[J_1 - J_2]_{\lambda_\varepsilon}}{C_{\min}^1 - C_{\max}^2} - \frac{d\xi_0}{dt}. \quad (3.5)$$

Выражение (3.5) это скорость движения границы λ_ε , где

$$J_i = -D_i \frac{\partial N_i}{\partial x} - \text{поток движения частиц в веществе,}$$

$$N_i = C_i - \text{концентрация азота в } i - \text{слое.}$$

Определим концентрацию для ε -слоя:

$$N_\varepsilon \equiv C_1 = C_s + \frac{C_{\min}^1 - C_s}{\text{erf}(Z_\varepsilon)} \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_\varepsilon t}}\right) \quad (3.6)$$

где

$$Z_\varepsilon = \frac{\lambda_\varepsilon}{\sqrt{4D_\varepsilon t}}, Z = \frac{x}{\sqrt{4Dt}}.$$

Поток диффундирующих частиц равен:

$$J_\varepsilon = -D_\varepsilon \frac{\partial N_\varepsilon}{\partial x} = -D_\varepsilon \frac{C_{\min}^1 - C_s}{\text{erf}(Z_\varepsilon)} \cdot \frac{d}{dZ} \cdot \text{erf}(Z) \cdot \frac{dZ}{dx}.$$

Разложим функцию ошибки в ряд Тейлора:

$$\text{erf}(Z) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} Z \left[1 - \frac{Z^2}{3} + \dots \right]$$

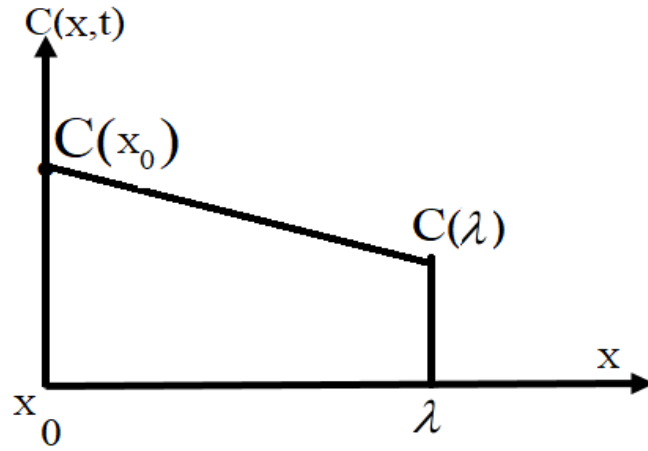
$$\frac{d}{dZ} \text{erf}(Z) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[1 - \frac{Z^2}{3} + \dots \right] \approx \frac{\text{erf}(Z)}{Z}.$$

Получим выражение для потока частиц в ε -слое:

$$J_{\varepsilon} = D_{\varepsilon} \frac{C_s - C_{\min}^1}{\operatorname{erf}(Z_{\varepsilon})} \cdot \frac{\operatorname{erf}(Z)}{Z} \cdot \frac{1}{\sqrt{4D_{\varepsilon}t}} = D_{\varepsilon} \frac{C_s - C_{\min}^1}{\frac{2}{\sqrt{\pi}} Z_{\varepsilon}} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{4D_{\varepsilon}t}} = D_{\varepsilon} \frac{C_s - C_{\min}^1}{\frac{\lambda_{\varepsilon}}{\sqrt{4D_{\varepsilon}t}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{4D_{\varepsilon}t}}$$

$$J_1 = D_{\varepsilon} \frac{C_s - C_{\min}^1}{\lambda_{\varepsilon}} = \frac{D_{\varepsilon} \Delta C_1}{\lambda_{\varepsilon}}. \quad (3.7)$$

2. Рассмотрим γ' - слой:



для γ' -слоя, $\xi_0 + \lambda_{\varepsilon} \rightarrow x_0$ (обозначения)

$\xi_0 + \lambda_{\varepsilon} + \lambda_{\gamma'} \rightarrow \lambda$ или $\lambda_{\gamma'}$ (обозначения)

Решение уравнения диффузии (3.1) для γ' -слоя имеет вид:

$$C_2(x,t) = C_{\max}^2 + A \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}}\right).$$

Из условия на границе $x = \lambda_{\gamma'}$: $C_{\min}^2 - C_{\max}^2 = A \operatorname{erf}\left(\frac{\lambda_{\gamma'}}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}}\right)$ получен коэффициент

$$A = -\frac{C_{\min}^2 - C_{\max}^2}{\operatorname{erf}\left(\frac{\lambda_{\gamma'}}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}}\right)}.$$

Таким образом, концентрация азота в γ -слое записывается в виде:

$$N_{\gamma'} = C_2(x, t) = C_{\max}^2 - \frac{C_{\max}^2 - C_{\min}^2}{\operatorname{erf}\left(\frac{\lambda_{\gamma'}}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}}\right)} \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}}\right). \quad (3.8)$$

Поток азота через границу:

$$J_{\gamma'} = -D_{\gamma'} \frac{\partial C_2}{\partial x} \Big|_{x=\lambda_{\gamma'}} \approx D_{\gamma'} \frac{C_{\max}^2 - C_{\min}^2}{\frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\lambda_{\gamma'}}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}}} \cdot \frac{\frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{x}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}}}{\frac{x}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{D_{\gamma'}t}},$$

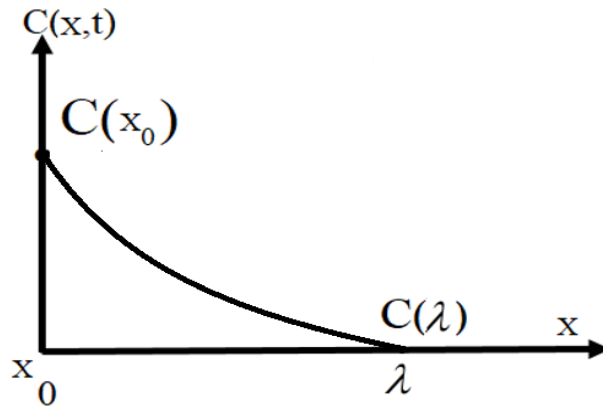
$$J_2 = J_{\gamma'} = D_{\gamma'} \frac{C_{\max}^2 - C_{\min}^2}{\lambda_{\gamma'}}. \quad (3.9)$$

Подставляя (3.7), (3.9) в выражение (3.5) получим скорость движения границы для λ_ε (3.10):

$$\frac{d\lambda_\varepsilon}{dt} = \frac{[J_1 - J_2]_{\lambda_\varepsilon}}{C_{\min}^1 - C_{\max}^2} - \frac{\partial d_0}{\partial t} = \frac{1}{\Delta C_{12}} \left(D_\varepsilon \frac{C_s - C_{\min}^1}{\lambda_\varepsilon} - D_{\gamma'} \frac{C_{\max}^2 - C_{\min}^2}{\lambda_{\gamma'}} \right) - \frac{d\xi_0}{dt},$$

$$\frac{d\lambda_\varepsilon}{dt} = \frac{1}{\Delta C_{12}} \left(\frac{D_\varepsilon \Delta C_1}{\lambda_\varepsilon} - \frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\lambda_{\gamma'}} \right) - v. \quad (3.10)$$

3. Рассмотрим α -слой:



для α' -слоя, $\xi_0 + \lambda_\varepsilon + \lambda_{\gamma'} \rightarrow x_0$ (обозначения)

$\xi_0 + \lambda_\varepsilon + \lambda_{\gamma'} + \lambda_\alpha \rightarrow \lambda$ или λ_α (обозначения)

Решение уравнения диффузии (3.1):

$$C(x,t) - C_{x_0} = A \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4D_\alpha t}} \right) \right).$$

Концентрация азота в α -слое:

$$N_\alpha = A \frac{d}{d \left(\frac{x}{\sqrt{4D_\alpha t}} \right)} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4D_\alpha t}} \right) \cdot \frac{d}{dx} \left(\frac{x}{\sqrt{4D_\alpha t}} \right). \quad (3.11)$$

Поток азота в α -слой через границу $\lambda_{\gamma'}$:

$$J_\alpha^+ \Big|_{x=\lambda_{\gamma'}} = -D_\alpha \frac{\partial N_\alpha}{\partial x} = \frac{BD_\alpha}{\sqrt{\pi} \sqrt{D_\alpha t}},$$

где

$$Z_2 = \frac{\xi_0 + \lambda_\varepsilon + \lambda_{\gamma'}}{4D_\alpha t} = 1.$$

$$J_{\gamma'}^- \Big|_{x=\lambda_{\gamma'}} = -D_{\gamma'} \frac{\partial C_{\alpha}}{\partial x} = \frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{\alpha}t}}\right)} \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{\gamma'}t}}\right)}{\frac{x}{\sqrt{4D_{\gamma'}t}}} - \frac{1}{\sqrt{4D_{\gamma'}t}} = \frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\lambda_{\gamma'}}.$$

С другой стороны,

$$\left[J_{\gamma'}^- - J_{\alpha}^+ \right]_{x=\xi_0+\lambda_{\varepsilon}+\lambda_{\gamma'}} = \Delta C_{23} \left[\frac{d\lambda_{\varepsilon}}{dt} + \frac{d\lambda_{\gamma'}}{dt} + \frac{d\xi_0}{dt} \right].$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\lambda_{\gamma'}} - \frac{BD_{\alpha}}{\sqrt{\pi} \sqrt{D_{\alpha}t}} &= \Delta C_{23} \left(\frac{d\lambda_{\varepsilon}}{dt} + \frac{d\lambda_{\gamma'}}{dt} + \frac{d\xi_0}{dt} \right), \\ \frac{d\lambda_{\gamma'}}{dt} &= \frac{1}{\Delta C_{23}} \left[\frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\lambda_{\gamma'}} - \frac{BD_{\alpha}}{\sqrt{\pi} \sqrt{D_{\alpha}t}} \right] - \frac{d\lambda_{\varepsilon}}{dt} - v. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Используя соотношения (3.10) и (3.12) получаем систему дифференциальных уравнений для определения динамики слоев:

$$\begin{cases} \frac{d\lambda_{\varepsilon}}{dt} = \frac{1}{\Delta C_{12}} \left(\frac{D_{\varepsilon} \Delta C_1}{\lambda_{\varepsilon}} - \frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\lambda_{\gamma'}} \right) - v \\ \frac{d\lambda_{\gamma'}}{dt} = \frac{1}{\Delta C_{23}} \left[\frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\lambda_{\gamma'}} - \frac{BD_{\alpha}}{\sqrt{\pi} \sqrt{D_{\alpha}t}} \right] - \frac{d\lambda_{\varepsilon}}{dt} - v \end{cases}. \quad (3.13)$$

В случае, если нет распыления поверхности, т.е. $v = 0$, то рост составных фаз (слоев) следует параболическому закону $\lambda_{\varepsilon,\gamma} = b_{\varepsilon,\gamma} \sqrt{t}$, где $b_{\varepsilon,\gamma}$ – константы и, следовательно:

$$\frac{d\lambda_{\varepsilon}}{dt} = \frac{b_{\varepsilon}}{2\sqrt{t}}, \quad \frac{d\lambda_{\gamma'}}{dt} = \frac{b_{\gamma'}}{2\sqrt{t}}.$$

Система (3.13) преобразуется к следующему виду:

$$\begin{cases} \frac{b_\varepsilon}{2\sqrt{t}} = \frac{D_\varepsilon \Delta C_1}{\Delta C_{12}} \frac{1}{b_\varepsilon \sqrt{t}} - \frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\Delta C_{12}} \frac{1}{b_{\gamma'} \sqrt{t}} \\ \frac{b_{\gamma'}}{2\sqrt{t}} = \frac{D_{\gamma'} \Delta C_2}{\Delta C_{23}} \frac{1}{b_{\gamma'} \sqrt{t}} - \frac{C_{\max}^3}{\Delta C_{23}} \frac{\sqrt{D_\alpha}}{\sqrt{\pi t}} - \frac{b_\varepsilon}{2\sqrt{t}} \end{cases}.$$

После некоторых преобразований, получим в общем виде систему уравнений для $b_{\varepsilon, \gamma}$

$$\begin{cases} b_\varepsilon = 2 \frac{\Delta C_1}{\Delta C_{12}} \frac{D_\varepsilon}{b_\varepsilon} - 2 \frac{\Delta C_2}{\Delta C_{12}} \frac{D_{\gamma'}}{b_{\gamma'}} \\ b_{\gamma'} = 2 \frac{\Delta C_2}{\Delta C_{23}} \frac{D_{\gamma'}}{b_{\gamma'}} - 2 \frac{C_{\max}^3}{\Delta C_{23}} \frac{\sqrt{D_\alpha}}{\sqrt{\pi}} - b_\varepsilon \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} b_\varepsilon = \sqrt{\frac{2}{\Delta C_{12}} \left(\Delta C_1 D_\varepsilon - \Delta C_2 \frac{b_\varepsilon}{b_{\gamma'}} D_{\gamma'} \right)} \\ b_{\gamma'} = -\frac{1}{2} \left(\frac{2C_{\max}^3}{\Delta C_{23}} \frac{\sqrt{D_\alpha}}{\sqrt{\pi}} + b_\varepsilon \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{2C_{\max}^3}{\Delta C_{23}} \frac{\sqrt{D_\alpha}}{\sqrt{\pi}} + b_\varepsilon \right)^2 + \frac{2\Delta C_2}{\Delta C_{23}} D_{\gamma'}} \end{cases}. \quad (3.14)$$

С учётом приближения $\frac{b_\varepsilon}{b_{\gamma'}} \sqrt{\frac{D_\varepsilon}{D_{\gamma'}}} \approx 1$:

$$\begin{cases} b_\varepsilon = \sqrt{\frac{2}{\Delta C_{12}} \left(\Delta C_1 D_\varepsilon - \Delta C_2 \frac{b_\varepsilon}{b_{\gamma'}} \sqrt{\frac{D_\varepsilon}{D_{\gamma'}}} \right)} \\ b_{\gamma'} = -\frac{1}{2} \left(\frac{2C_{\max}^3}{\Delta C_{23}} \frac{\sqrt{D_\alpha}}{\sqrt{\pi}} + b_\varepsilon \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{2C_{\max}^3}{\Delta C_{23}} \frac{\sqrt{D_\alpha}}{\sqrt{\pi}} + b_\varepsilon \right)^2 + \frac{2\Delta C_2}{\Delta C_{23}} D_{\gamma'}} \end{cases}.$$

При $v = 0$ и параметрах

$$\begin{cases} C_S \approx 11.5 \text{ масс.}\% \\ C_{\min}^1 \approx 7.71 \text{ масс.}\% \end{cases}, \begin{cases} C_{\max}^2 \approx 5.91 \text{ масс.}\% \\ C_{\min}^2 \approx 5.76 \text{ масс.}\% \end{cases} \text{ и } C_{\max}^3 \approx 0.1 \text{ масс.}\%$$

система (3.14) совпадает с выражениями для коэффициентов в работе [14]:

$$\begin{cases} b_{\varepsilon} \approx \sqrt{(4D_{\varepsilon} - 0.2D_{\gamma'})} \\ b_{\gamma'} \approx 0.5 \left[-\left(b_{\varepsilon} + 0.02\sqrt{D_{\alpha}}\right) + \sqrt{\left(b_{\varepsilon} + 0.02\sqrt{D_{\alpha}}\right)^2 + 0.2D_{\gamma'}} \right]. \end{cases}$$

Из соотношений (3.14) запишем систему уравнений для $\lambda_{\varepsilon, \gamma'} = b_{\varepsilon, \gamma'} \sqrt{t}$:

$$\begin{cases} \lambda_{\varepsilon} = \sqrt{\frac{2}{\Delta C_{12}} (\Delta C_1 D_{\varepsilon} - \Delta C_2 D_{\gamma'})} t \\ \lambda_{\gamma'} = -\frac{1}{2} \left(\frac{2C_{\max}^3}{\Delta C_{23}} \frac{\sqrt{D_{\alpha}}}{\sqrt{\pi}} + b_{\varepsilon} \right) \sqrt{t} + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{2C_{\max}^3}{\Delta C_{23}} \frac{\sqrt{D_{\alpha}}}{\sqrt{\pi}} + b_{\varepsilon} \right)^2 + \frac{2\Delta C_2}{\Delta C_{23}} D_{\gamma'} t}. \end{cases} \quad (3.15)$$

$$\text{Здесь } \Delta C_1^i = C_{\max}^i - C_{\min}^i; \quad \Delta C_{12} = C_{\min}^1 - C_{\max}^2; \quad \Delta C_{23} = C_{\min}^2 - C_{\max}^3.$$

Система уравнений (3.15) указывает на рост и движение ε , γ' -слоёв в зависимости от двух доминирующих параметров: времени и коэффициента диффузии. Рост ε -слоя, зависит от коэффициента диффузии азота в слоях ε и γ' , а рост слоя γ' , зависит от коэффициента диффузии азота в трех фазах ε , γ' и α . Это означает, что характеристики каждого слоя могут влиять на рост других слоев; например, диффузия азота через ε -слой (вход в γ'), а также диффузия азота через α -зону (выход γ') могут влиять на скорость роста слоя γ' . Таким образом, коэффициент диффузии азота в ε -нитриде и α -зоне, D_{ε} и D_{α} , также должен быть принят во внимание.

Система (3.13) описывает взаимосвязанный рост ε и γ' слоев, динамика которого зависит от времени, коэффициента диффузии и скорости распыления. При отсутствии распыления и в предположении, что ширина слоя является функцией квадратного корня времени $\lambda_{\varepsilon, \gamma'} : \sqrt{t}$, решение системы (3.13) допускает аналитические оценки для ширины слоев, совпадающие с формулами работы [14].

Система уравнений (3.13) и формулы для распределения концентрации азота в железе в слоях ε и γ' , а также α -диффузионной зоне

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{\varepsilon}(x,t) = C_S + \frac{C_{\min}^1 - C_S}{\operatorname{erf}\left(\frac{\lambda_{\varepsilon}}{\sqrt{4D_{\varepsilon}t}}\right)} \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{\varepsilon}t}}\right) \\ C_{\gamma'}(x,t) = C_{\max}^2 + \frac{C_{\min}^2 - C_{\max}^2}{\operatorname{erf}\left(\frac{\lambda_{\gamma'}}{\sqrt{4D_{\gamma'}t}}\right)} \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{\gamma'}t}}\right) \\ C_{\alpha}(x,t) = C_{\max}^3 - C_{\max}^3 \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{\alpha}t}}\right) \end{array} \right.$$

образуют полную диффузионную модель для азотирования чистого железа и нелегированных сталей, позволяющую моделировать развитие составного слоя во время азотирования независимо от способа азотирования (плазменное, низкоэнергетическая имплантация азота).

3.2 Численные расчеты формирования ионно-модифицированных слоев железа ионами азота

В предложенных ниже уравнениях все влияющие коэффициенты диффузии рассматриваются для оценки толщины слоя. Коэффициент диффузии азота в фазе ε , γ' и α в зависимости от температуры определяются в работах [14, 15]:

$$D_{\varepsilon} = 2.1 \times 10^{-8} \exp\left(\frac{-93517 \frac{J}{mol}}{RT}\right);$$

$$D_{\gamma'} = 1.7 \times 10^{-9} \exp\left(\frac{-64000 \frac{J}{mol}}{RT}\right);$$

$$D_{\alpha} = 6.6 \times 10^{-7} \exp \left(\frac{-77900 \frac{J}{mol}}{RT} \right);$$

Значения коэффициента диффузии азота в ε , γ' , α слоях, рассчитанные при различных температурах с помощью формул D_{ε} , D_{γ} , D_{α} указаны в Таблице 3.2.

Таблица 3.2 – Коэффициенты диффузии азота в ε , γ , α слоях

Повышение температуры	°C	500	510	520	530	540	550	560	570	580
	K	773	783	793	803	813	823	833	843	853
	ε	1.0	1.2	1.5	1.7	2.1	2.4	2.9	3.4	3.9
	γ	7.9	9.0	10.2	11.5	12.9	14.5	16.3	18.1	20.2
	α	359.4	419.6	487.9	565.3	652.5	750.6	860.5	983.3	1120.2

3.2.1 Влияние температуры азотирования

Повышение температуры азотирования приводит к увеличению коэффициента диффузии во всех фазах с практически одинаковой скоростью и уменьшению соотношений $D_{\alpha}/D_{\varepsilon}$ и $D_{\gamma}/D_{\varepsilon}$, но при этом увеличивается соотношение D_{α}/D_{γ} .

Коэффициент диффузии в фазе α примерно в 100 и 10 раз больше, чем у ε и γ .

Рисунки 3.2-3.4 показывают расчётную толщину ε – и γ' – слоёв в зависимости от времени азотирования (4 часа) при постоянной температуре азотирования 500 °C, 540 °C и 570 °C, соответственно.

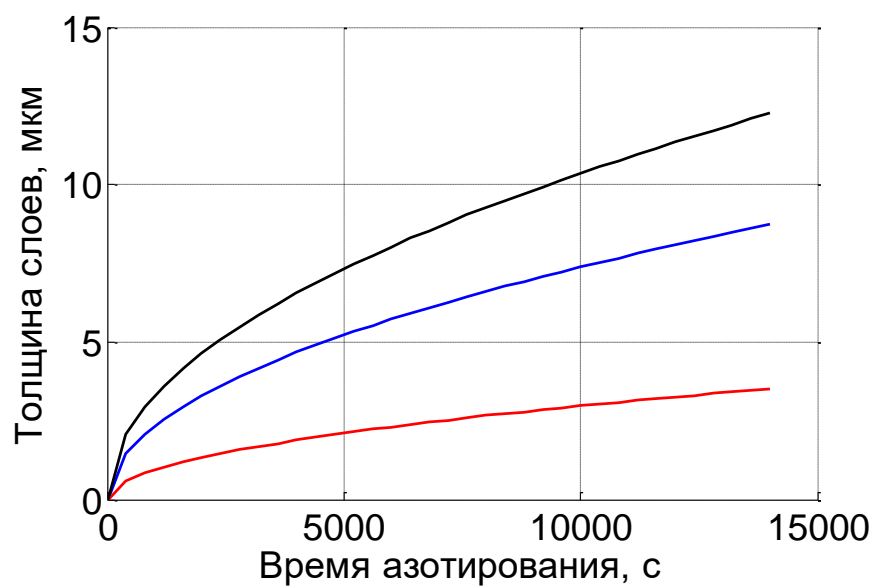


Рисунок 3.2 – Толщина ϵ -слоя (синяя), γ -слоя (красная) и ϵ -слой+ γ -слой (черная линия) в зависимости от времени азотирования при $T=500\text{ }^{\circ}\text{C}$

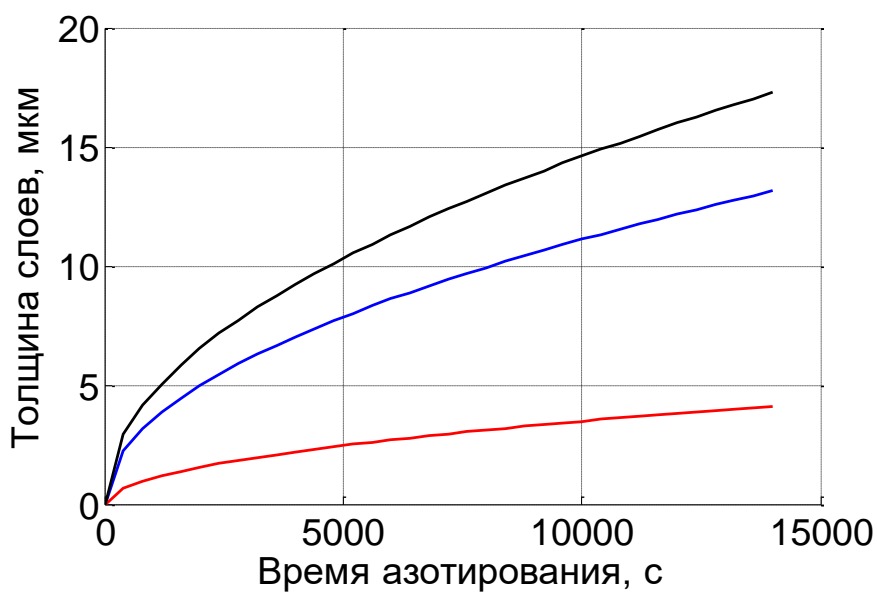


Рисунок 3.3 – Толщина ϵ -слоя (синяя), γ -слоя (красная) и ϵ -слой+ γ -слой (черная линия) в зависимости от времени азотирования при $T=540\text{ }^{\circ}\text{C}$

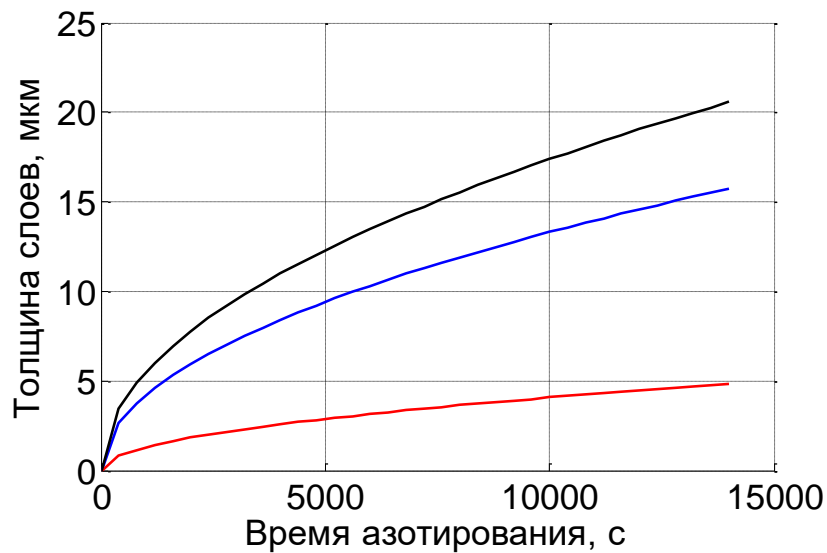


Рисунок 3.4 – Толщина ε -слоя (синяя), γ -слоя (красная) и ε -слой+ γ -слой (черная линия) в зависимости от времени азотирования при $T=570\text{ }^{\circ}\text{C}$

Из рисунков 3.2-3.4 видно, что с увеличением температуры азотирования увеличивается глубина проникновения азота, увеличивается скорость азотирования (коэффициент диффузии) и соответственно, ширина слоев. На рисунке 3.5 показано распределение концентрации азота при температуре азотирования $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ и $570\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Можно сделать вывод, что при увеличении температуры азотирования толщина слоев ε и γ' скорость роста каждого слоя высокая на начальных стадиях процесса, но затем существенно уменьшается. Это объясняется параболической зависимостью ширины слоев от времени.

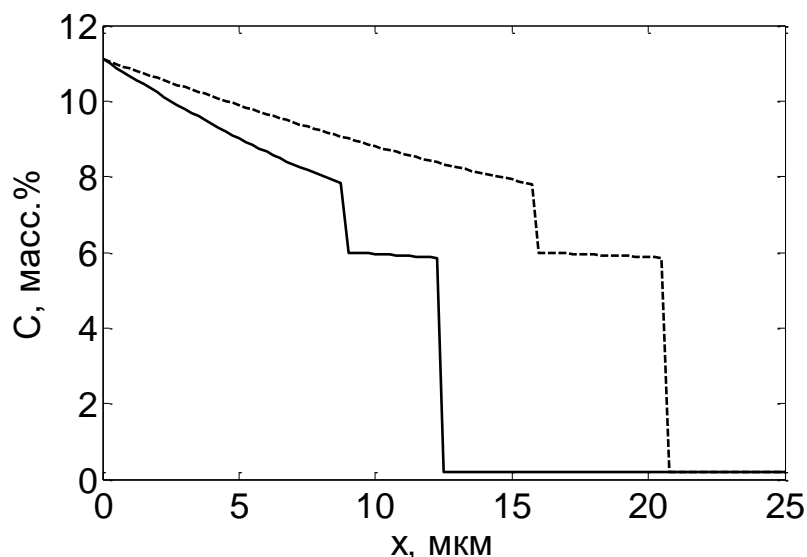


Рисунок 3.5 – Распределение концентрации азота при разной температуре азотирования: 500 °C (—) и 570 °C (---)

3.2.2 Влияние концентрации азота на границе образца

Проведем исследование влияния концентрации азота на поверхности мишени: $C_s = 11, 8$ и 6 масс% при температуре азотирования 500°C .

На рисунках 3.2, 3.6 и 3.7 показана динамика ширины слоев. Как видно из рисунков, значение концентрации азота на поверхности азотируемого железа влияет как на ширину слоев, так и на их количество. При $C_s = 11$ масс% ширина ε -слоя больше, чем γ -слоя (рис. 3.2). При $C_s = 8$ масс % уже ширина γ -слоя больше, чем ширина ε -слоя (рис. 3.8), а при $C_s = 6$ масс% формируется только γ -слой (рис. 3.7).

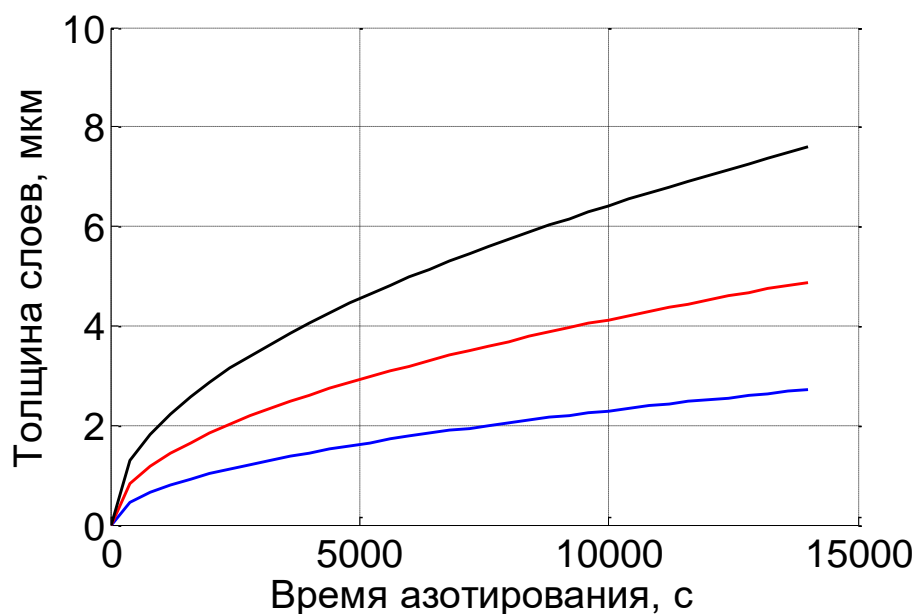


Рисунок 3.6 – Толщина ϵ -слоя (синяя), γ -слоя (красная) и ϵ -слоя + γ -слоя (черная линия) в зависимости от времени азотирования, $C_s=8$ масс %; $T=500$ °C

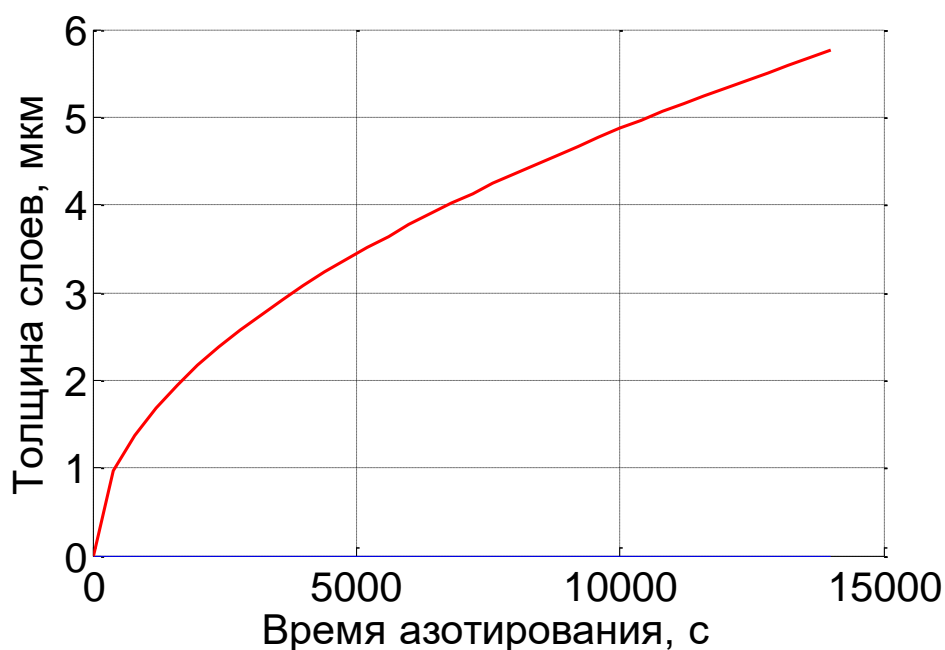


Рисунок 3.7 – Толщина ϵ -слоя (синяя), γ -слоя (красная) в зависимости от времени азотирования, $C_s=6$ масс %; $T=500$ °C

Следует отметить, что иногда трудно отличить ϵ -слой от γ' -слоя при металлографическом исследовании. Например, экспериментальные

измерения толщины составного слоя для плазменного азотирования чистого железа, проведенные в работе [11] при температуре 550°C, показали, что, хотя между измерением и расчетными данными имеется хорошее согласие, некоторые незначительные различия все ещё существуют, из-за смешивания и сочетания ε и γ' нитридов в плазменном азотировании. С другой стороны, нитриды ε и γ' можно четко различить как разделенные и непрерывные слои в процессе азотирования газа. Кроме того, обычно толщина ε выше, чем у γ' -нитрида при азотировании газа, в то время как в условиях азотирования плазмой толщина γ' больше, чем у ε -нитрида. Эти явления вызваны несколькими параметрами процесса, такими как распыление, поверхностные реакции и бомбардировка поверхности заряженным веществом во время азотирования плазмы [11].

Используя, полученные выражения (3.6), (3.8), (3.11) для концентрации азота в ε , γ' , α слоях, построим распределение концентрации азота по глубине при постоянной температуре азотирования $T=500^\circ\text{C}$. Из рисунков 3.8-3.10 видно влияние приповерхностной концентрации азота на структуру нитридных слоев.

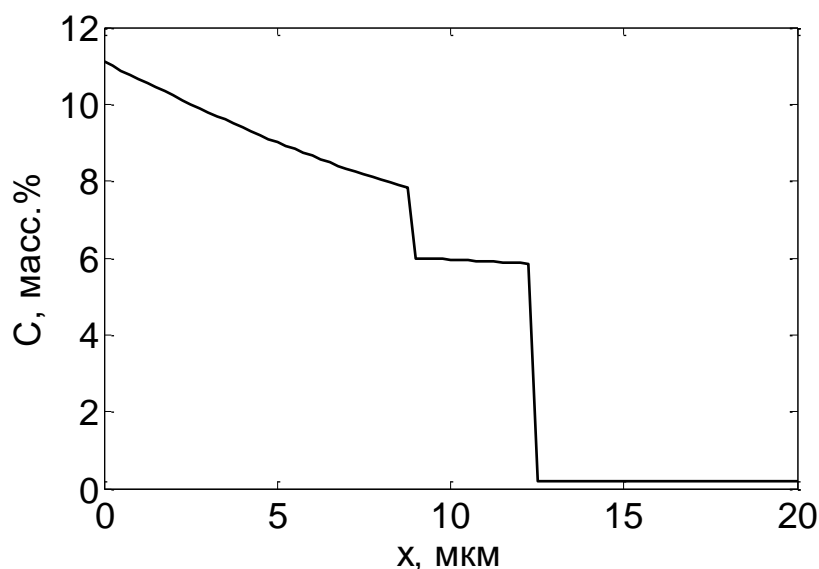


Рисунок 3.8 – Распределение концентрации азота по глубине,

$$C_s=11 \text{ масс \%}; T=500^\circ\text{C}$$

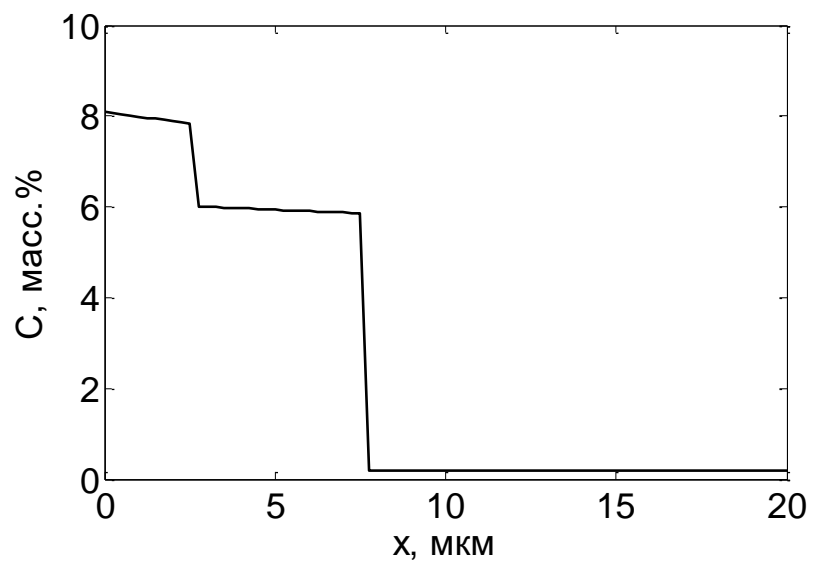


Рисунок 3.9 Распределение концентрации азота по глубине,
 $C_s=8$ масс %; $T=500^\circ\text{C}$

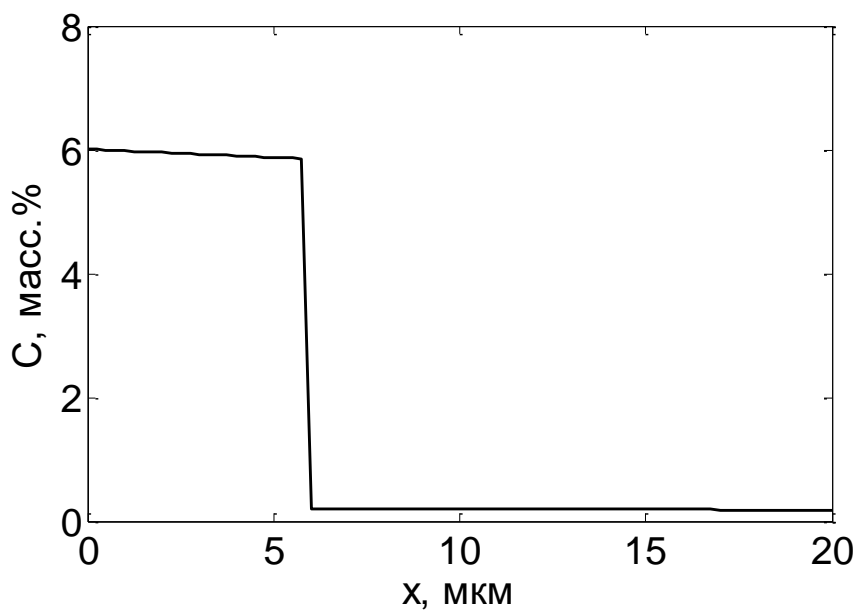


Рисунок 3.10 – Распределение концентрации азота по глубине,
 $C_s=6$ масс %; $T=500^\circ\text{C}$

3.2.3 Влияние распыления поверхности ионами азота

Распыление поверхности азотируемой мишени влияет на динамику слоев и распределение концентрации в образце. На рисунке 3.11 показана динамика ε -слоя, γ -слоя при отсутствии распыления ($v=0$) и при скорости распыления $v=10^{-6}$ м/с. На рисунке 3.12 показано распределение концентрации по глубине. Видно, что чем больше время азотирования, тем больше влияние оказывает на глубину проникновения азота.

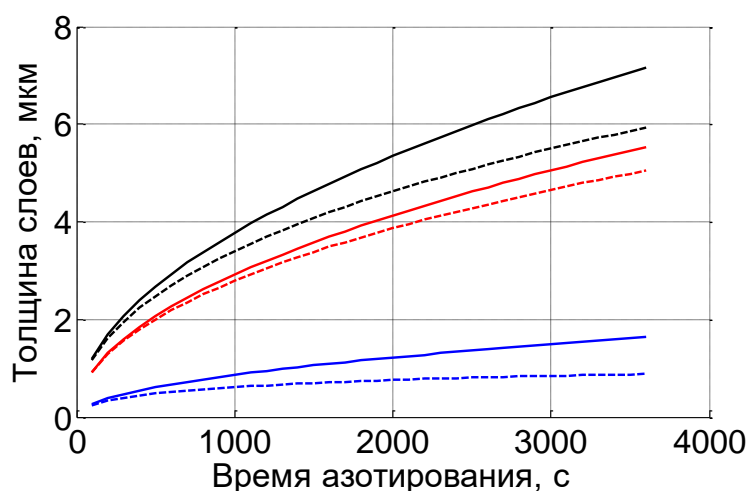


Рисунок 3.11 – Динамика ε -слоя (красная), γ -слоя (синяя) и ε -слой+ γ -слой (черная линия); $v=0$ — (—), $v=10^{-6}$ м/с — (---), $C_s=9$ масс %; $T=500^\circ\text{C}$

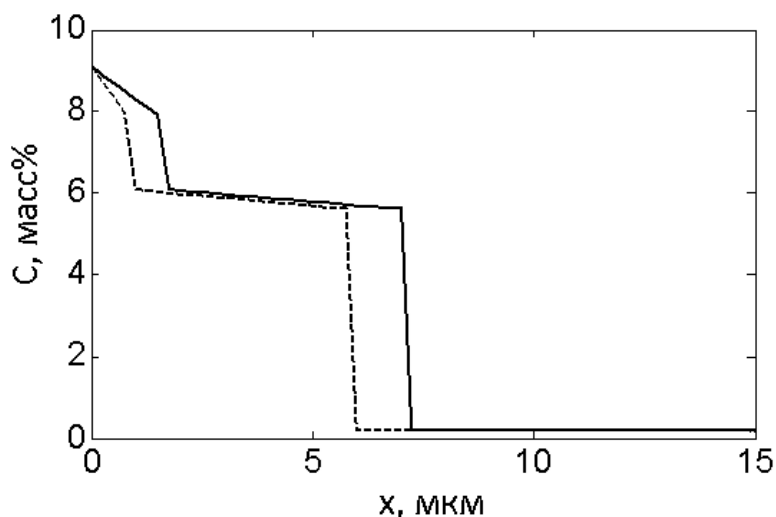


Рисунок 3.12 – Распределение концентрации, $v=0$ — (—), $v=10^{-6}$ м/с — (---), $C_s=9$ масс %; $T=500^\circ\text{C}$

IV Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Данный раздел является обязательной частью данной работы, представляющий собой детальный анализ экономической эффективности проекта. Он представляет собой оценку коммерческой ценности разработки и включает следующие этапы:

- организация работ по научно-исследовательскому проекту;
- определение возможных альтернатив проведения научных исследований;
- планирование научно-исследовательских работ;
- оценки коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения;
- определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

С целью выявления потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование.

Целевой рынок – сегменты рынка, на котором в будущем будет продаваться разработка. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга).

Объектом исследования является железная мишень, на поверхности которой, путём ионно-плазменного азотирования формируются ионно-модифицированные слои.

Азотирование один из самых популярных методов доведения металлических деталей до наилучших показателей сопротивления изнашиванию. Насыщение азотом поверхностные слои имеют высокое сопротивление коррозии. Азотирование стало ключевой операцией, не требующей дальнейшего термообработки, в результате чего, этот процесс стал необходимым для обработки деталей в машиностроении, станкостроение и в других сферах, выдвигающих высокие требования к составным элементам.

Таблица 4.1 – Карта сегментирования рынка услуг

		Организации		
		Коммерческие организации	Исследовательские центры (ТПУ, РНФ)	Оборонные комплексы
	Получение системы дифференциальных уравнений			
	Научно-исследовательская работа			
	Прогнозирование модификации слоёв			

Из карты сегментирования услуг видно, что целевым рынком данного исследования будут исследовательские центры.

К коммерческим и государственным организациям можно отнести все предприятия, которые так или иначе связаны с нанесением покрытий. Эти организации могут являться как прямыми потребителями, так и компаниями-перекупщиками.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам. Важно реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

С этой целью может быть использована вся имеющаяся информация о конкурентных разработках:

- технические характеристики разработки;
- конкурентоспособность разработки;
- уровень завершенности научного исследования (наличие макета, прототипа и т.п.);
- бюджет разработки;
- уровень проникновения на рынок;
- финансовое положение конкурентов, тенденции его изменения и т.д.

Для достижения оптимальной ресурсоэффективности необходимо провести анализ существующих решений по данной задаче. Для этого используется оценочная карта.

Кф –система уравнений с учётом распыления поверхности.

К1 –конкурент, система уравнений без учёта распыления поверхности.

Таблица 4.2 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес	Баллы	Конкурентоспособность
-----------------	-----	-------	-----------------------

	критерия	B_{ϕ}	B_{kl}	K_{ϕ}	K_{kl}
1	2	3	4	6	7
Технические критерии оценки ресурсоэффективности					
1. Универсальность	0,2	5	4	1	0,8
2. Точность	0,1	4	4	0,4	0,4
3. Уровень концентрации	0,2	5	4	1	0,8
4. Толщина слоёв	0,2	5	4	1	0,8
5. Влияние на деталь	0,1	5	4	0,5	0,4
6. Аналитический результат	0,1	5	4	0,5	0,4
7. Численный результат	0,1	5	4	0,5	0,4
Итого	1	34	28	4,9	4

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i, \quad (4.1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Анализ конкурентоспособности показал, что технические и экономические показатели оценки ресурсоэффективности данной разработки опережают показатели конкурента. Основными минусами данной разработки является цена, так как для азотирования применяются дорогие легированные стали, азотированные детали получаются в 2-3 раза дороже, чем обычные, а также длительность процесса, которая может занимать до 2 суток.

4.2 SWOT-анализ

SWOT-анализ – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы). Результаты SWOT-анализа представлены в таблице 4.3

Таблица 4.3. - SWOT – анализ

	Сильные стороны: С1. Получение системы дифференциальных уравнений с учётом распыления поверхности ионами азота С2. Наблюдать изменение толщины слоя, а также концентрации азота в каждом слое	Слабые стороны: Сл1. Зависимость результатов эксперимента от значения приближения Сл2. Проведение многочисленных эмпирических экспериментов для подтверждения расчётов
Возможности: В1. Использование полученной системы дифференциальных уравнений для расчёта толщины составного слоя в различных процессах азотирования	1. Интерполирование этапов исследования на другие методы упрочнения материалов 2. Реализация программных продуктов для низкоквалифицированных специалистов	1. Ввод значения приближения как дополнительного параметра в уравнения 2. Использование расчётов с целью исключения порчи дорогостоящих материала

В2. Возможность прогнозирования модификации слоёв В3. Доработка в связи с пожеланиями		
Угрозы: У1. Ошибка на начальных этапах исследования У2. Отсутствие коммерческого интереса	1. Повышение внимательности при проведении расчётов 2. Привлечение высококвалифицированных специалистов при исследовании 2. Анализ рынка потребителей	1. Использование высокопроизводительного оборудования при расчётах 2. Устранение слабых сторон проекта, а также повышение технологического пакета данной разработки

Проанализировав характер НТР можно сделать вывод, что наиболее оптимальной стратегией выхода разработки на рынок является стратегия совместной предпринимательской деятельности. Совместная предпринимательская деятельность – это стратегия, которая основана на соединении общих усилий фирмы с коммерческими предприятиями партнера для создания производственных и маркетинговых мощностей. Эта стратегия выбрана, так как необходимо найти стабильный рынок заказов и сбыта товара.

Полученная в ходе исследования система дифференциальных уравнений находится на стадии согласования аналитических результатов эксперимента с эмпирическими. Ведутся подготовки к получению экспериментальных значений параметров толщины слоёв и концентрации азота для различных фаз азотирования. Анализ показал, что результаты исследования, наряду с

преимуществами имеют ряд недостатков, которые будут устранены на стадии доработки проекта.

4.3 Инициация проекта

4.3.1 Цели и результат проекта

В данном разделе необходимо привести информацию о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Под заинтересованными сторонами проекта понимаются лица или организации, которые активно участвуют в проекте или интересы которых могут быть затронуты как положительно, так и отрицательно в ходе исполнения или в результате завершения проекта. Это могут быть заказчики, спонсоры, общественность и т.п. Информацию по заинтересованным сторонам проекта представить в таблице 4.4.

Таблица 4.4 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ	Получение системы дифференциальных уравнений с учётом распыления поверхности азотом
Предприятия отраслей машиностроения, энергетики, газо-, нефтехимической индустрии, двигателестроения	Точность полученных результатов и их надёжность

В таблице 4.5 необходимо представить информацию о иерархии целей проекта и критериях достижения целей. Цели проекта должны включать цели в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Таблица 4.5 – Цели и результат проекта

Цели проекта	Рассмотрение диффузионной модели, а также модели формирования ионно-модифицированных слоёв (фаз) железа и получение системы уравнений для самосогласованной динамики слоев с учетом распыления поверхности. Сопоставление результатов численного и аналитического моделирования с экспериментом.
Ожидаемые результаты проекта	Построение модели с целью прогнозирования модификации слоёв, определение толщины слоя.
Критерии приёмки результата проекта	Точность полученных результатов и их надёжность
Требования	Согласование результатов моделирования с экспериментальными данными

4.3.2 Организационная структура проекта

На данном этапе работы необходимо решить следующие вопросы: кто будет входить в рабочую группу данного проекта, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте. Данная информация представлена в таблице 4.6.

Таблица 4.6 – Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час
Коваль Т.В., ТПУ, ИШИТР,	Научный руководитель	Консультирование, определение задач,	32

доктор физико-математических наук, профессор		контроль выполнения	
Набокова О.О., ТПУ, ИШИТР, студент	Магистр	Выполнение ВКР	810
ИТОГ:			842

4.4 Планирование управлением научно-технических проектом

4.4.1 Структура работ в рамках научного исследования

Для организации и систематизации работы выпускника необходимо сформировать план работ. Данный этап предназначен для обеспечения своевременного и эффективного выполнения задания ВКР.

В таблице 4.7 представлен перечень этапов, работ и распределение исполнителей. В качестве исполнителей были выбраны следующие участники процесса:

- студент (С);
- научный руководитель (НР).

Таблица 4.7 – Основные этапы работ

Номер работы	Название	Длительность, дни	Дата начало работ	Дата окончания работ	Должность исполнителя
1	Выбор темы ВКР	2	26.11.2018	27.11.2018	Руководитель
2	Утверждение ТЗ	2	28.11.2018	29.11.2018	Руководитель, магистр
3	Анализ	15	30.11.2018	17.12.2018	Магистр

	литературы и выработка концептуальной модели алгоритма				
4	Выбор среды и инструментов разработки для реализации алгоритма	7	18.12.2018	25.12.2018	Магистр, руководитель
5	Календарное планирование работ	5	26.12.2018	31.12.2018	Руководитель
6	Детальная проработка концепции	21	09.01.2019	01.02.2019	Магистр
7	Выработка архитектурных решений для программной реализации	14	02.02.2019	18.02.2019	Магистр
8	Реализация алгоритма	30	19.02.2019	27.03.2019	Магистр
9	Отладка	20	28.03.2019	19.04.2019	Магистр
10	Тестирование и анализ результатов	10	20.04.2019	02.05.2019	Магистр
11	Написание	15	04.05.2019	22.05.2019	Магистр

	отчёта и оформление результатов исследования				
12	Защита работы	1	6.06.2019	6.06.2019	Магистр

В результате анализа определено 12 этапов работ, которые распределены на 2 исполнителя: студент и научный руководитель.

На основе полученных данных строится Диаграмма Ганта, которая наглядно отображает оптимальные сроки начала и окончания выполнения работ, представленная на рисунке 4.1.

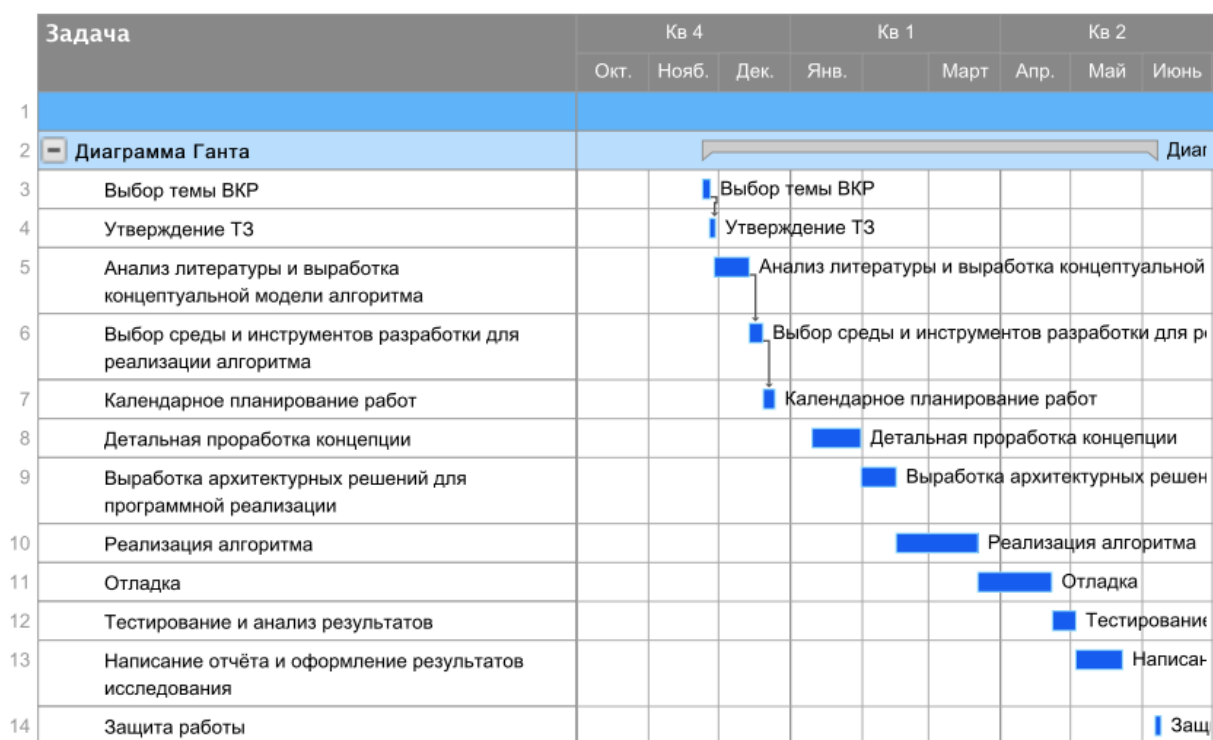


Рисунок 4.1 Диаграмма Ганта

4.5 Бюджет научно-технического исследования

Формирование бюджета для выполнения научно-технического исследования складывается из следующих статей:

- материальные затраты;
- оборудование для научного исследования;
- основная заработная плата;
- дополнительная заработная плата;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

4.5.1 Затраты на материалы

В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме.

Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. В стоимость материальных затрат включают транспортно-заготовительные расходы (3 – 5 % от цены). В эту же статью включаются затраты на оформление документации (канцелярские принадлежности, тиражирование материалов). Расчет затрат на материалы приведен в таблице 4.8.

Таблица 4.8 – Расчёт затрат на материалы

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, руб.

Бумага	Лист	110	2	220
Итого				220

4.5.2 Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме. Расчет затрат на спецоборудование для научных работ представлен в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Затраты на оборудование

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, руб.
Компьютер	шт	1	30 000	30 000
Годовая лицензия пакета MATLAB	Оплата за год	1	62 061	25 859 (за 5 мес.)
TPUNet	Оплата за 1 месяц	3	350	1 050
Microsoft Office	Подписка на 1 месяц	3	375	1 125
Итого				58 034

4.5.3 Основная заработная плата исполнителей темы

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных

производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20–30 % от тарифа или оклада.

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НТИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп}, \quad (4.2)$$

где, $З_{осн}$ – основная заработная плата, $З_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $З_{осн}$).

Основная заработная плата руководителя рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_p, \quad (4.3)$$

где $З_{осн}$ – *основная* заработная плата одного работника, T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн., $З_{дн}$ – *среднедневная* заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_m \cdot M}{F_d}, \quad (4.4)$$

где $З_m$ – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года; при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя; F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 4.10).

Таблица 4.10 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней	52	52
- выходные дни	14	14
- праздничные дни		
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	48
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	251

Месячный должностной оклад работника:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (4.5)$$

где $З_{\text{тс}}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $З_{\text{тс}}$);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5;

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томской области).

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 4.11.

Таблица 4.11 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	З _{тс} , руб.	k _{пр}	k _д	k _р	З _м , руб.	З _{дн} , руб.	T _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.	З _{доп} , руб.	З _{зп} , руб.
Руководитель	47104	0,3	-	1,3	79605	3298	5,3	17479	1748	19227
Студент	12663	0	-	1,3	16462	682	135	92070	9207	101277
Итого З_{осн}									10955	120504

*Дополнительная з/п 10% от основной для руководителя и инженера.

Итого суммарные затраты на заработную плату всем участникам проекта составляют 131 459 рублей.

4.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$З_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{осн} + З_{доп}), \quad (4.6)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.), дополнительная зарплата отсутствует.

На 2014 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2017 году водится пониженная ставка – 27,1%.

Отчисления во внебюджетные фонды рекомендуется представлять в таблице 4.12.

Таблица 4.12 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Руководитель	Магистр
Основная заработная плата, руб.+дополнит.	19 227	101 277
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,271	0,271
Сумма отчислений	5 210	27 446
Итого	32 656	

4.5.5 Накладные расходы

В данную статью входят расходы на содержание аппарата управления и общехозяйственных служб. По этой статье учитываются оплата труда административно-управленческого персонала, содержание зданий, оргтехники и хозинвентаря, амортизация имущества, расходы по охране труда и подготовке кадров.

Накладные расходы составляют 30 % от суммы основной и дополнительной зарплаты работников, участвующих в выполнение темы. Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = K_{\text{накл}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (4.7)$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

Накладные расходы составят: $C_{\text{накл}} = 0,3 * 120\,504 = 36\,151$ руб.

4.5.6 Прочие затраты

Затраты на электроэнергию рассчитываются по формуле:

$$C = C_{\text{эл}} * P * F_{\text{об}}, \quad (4.8)$$

где $C_{\text{эл}}$ – тариф на промышленную электроэнергию (5.8 руб. за 1 кВт·ч); P – мощность оборудования, кВт; $F_{\text{об}}$ – время использования оборудования, ч.

Потребляемая мощность ПК 650 Вт. За чистое время работы ПК возьмём 124 дня по 6 часов. Итого 744 часа.

Стоимость электроэнергии равна $5,8 * 0,65 * (135 * 6) = 3\,053$ рублей.

4.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 4.13.

Таблица 4.13 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
1. Материальные затраты НТИ	220
2. Затраты на оборудование	58 034
3. Затраты по основной заработной плате	120 504

исполнителей темы	
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	10 955
5. Отчисления во внебюджетные фонды	32 656
6. Прочие прямые затраты (электроэнергия)	3 053
7. Накладные расходы	36 151
Бюджет затрат НТИ	261 573

4.7 Реестр рисков

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты. Информация по данному разделу была сведена в таблицу 4.14.

Таблица 4.14 - Реестр рисков

№	Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность	Влияние	Уровень риска*	Способы смягчения риска
1	Неточность экспериментальных данных	Несоответствие расчетных и реальных значений толщины слоя	1	3	Низкий	Проведение экспериментов для подтверждения расчётов
2	Поломка ноутбука	Затруднение проведения вычислений	3	4	Выше среднего	Предоставление студенту рабочего места с компьютером и необходимым ПО

4.8 Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} \quad (4.9)$$

где $I_{\text{финр}}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_p – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i \quad (4.10)$$

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i-го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i-го варианта исполнения разработки;

b_i^a , b_i^p – бальная оценка i-го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в таблице 15.

Исп.1 – Азотирование металлов;

Исп.2 – Цементация металлов;

Таблица 4.16 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2
1. Соответствие теории и эксперимента	0,25	4	4
2. Удобство в эксплуатации	0,1	5	3
3. Температура нагрева	0,3	5	3
4. Стоимость внедрения	0,2	4	4
5. Время проведения измерений	0,15	3	4
ИТОГО	1	21	18

$$I_{p-ucn1} = 4 \cdot 0,25 + 5 \cdot 0,1 + 5 \cdot 0,3 + 4 \cdot 0,2 + 3 \cdot 0,15 = 4,25$$

$$I_{p-ucn2} = 4 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,1 + 3 \cdot 0,3 + 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,15 = 3,6$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{исп.}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп.1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{финр.1}^{исп.1}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{финр.2}^{исп.2}} \text{ и т.д.} \quad (4.11)$$

Полученное значение интегрального показателя эффективности исполнения разработки превысил максимальный балл в системе оценивания. Это говорит о том, что результат работы можно считать положительным, так как оценка интегрального показателя ресурсоэффективности близка к максимальной.

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (таблица 17) и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}} \quad (4.12)$$

Таблица 4.17 - Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4.25	3.6
3	Интегральный показатель эффективности	4.25	3.6
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1.18	0.85

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет понять и выбрать более эффективный вариант решения поставленной в магистерской работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

Вывод к разделу

Результатом научно-исследовательской работы является получение системы дифференциальных уравнений с учётом распыления поверхности азотом. Данный проект предполагает получение экономической, социологической и ресурсной эффективности.

Также была распланирована структура работ проекта и определены ответственные должности для их выполнения. В соответствии с назначенными работами была рассчитана их трудоемкость и составлен график работ (диаграмма Ганта).

Общий бюджет НТИ составил 261 573 рубль. Он включает в себя затраты на основную и дополнительную заработную плату работников, материальные затраты, отчисления на внебюджетные фонды и накладные расходы.

V. Социальная ответственность

Охрана и обеспечение безопасности условий труда для работников, а также ликвидация заболеваний, возникших в ходе профессиональной деятельности, является неотъемлемым условием организации рабочего процесса в современном обществе.

В настоящее время персональные ЭВМ (ПЭВМ) находят все большее применение во всех сферах человеческой деятельности. Их можно встретить в сфере образования, производстве, научно-исследовательских работах и т.д. Однако, не смотря на свою полезность и многофункциональность, компьютер является еще и источником вредного воздействия на организм человека, благодаря чему возникают многие профессиональные заболевания. Поэтому каждый пользователь должен быть ознакомлен с вредным воздействием ПЭВМ на организм человека и необходимых мерах защиты от этих воздействий.

Результатами разработки данного раздела будут являться достижение следующих целей:

- выявление и изучение вредных и опасных производственных факторов при работе с ПЭВМ;
- оценка условий труда;
- определение способов снижения действия вредных факторов до безопасных пределов или, по возможности, полного их исключения;
- рассмотрение вопросов техники пожарной безопасности и охраны окружающей среды.

Объектом исследования является рабочее место (РМ) и помещение, в котором оно находится.

5.1 Анализ опасных и вредных факторов

Вредные факторы – это производственные факторы, воздействие которых приводит на работающего при определенных условиях к заболеванию или снижению работоспособности. При изменении уровня и времени воздействия вредные производственные факторы могут стать опасными.

Опасные факторы – это производственные факторы, воздействие которых на работающего в конкретных условиях может привести к травмам, а также другим внезапным резким ухудшениям здоровья.

При работе с ПЭВМ пользователь (оператор, программист) подвергается воздействию опасных и вредных производственных факторов:

1. электромагнитных полей и ионизирующего излучения;
2. электростатических полей;
3. шуму и вибрации;
4. отклонение от норм параметров микроклимата;
5. недостаточная освещённость рабочей зоны;
6. психофизиологические факторы.

Эти факторы могут привести к ухудшению здоровья пользователя, а также к профессиональным заболеваниям.

Отрицательное воздействие ПЭВМ на человека носит комплексный характер комбинации вредных и опасных производственных факторов:

1. монитор компьютера является источником: электромагнитного поля (ЭМП); электростатического поля; рентгеновского излучения; вредного действия светового потока и отраженного света;
2. значительной нагрузке подвергается зрительный аппарат в результате несовершенства способов создания изображения на экране монитора;
3. работа компьютера сопровождается акустическими шумами, включая ультразвук;

4. несоблюдение эргономических параметров, обеспечивающих безопасность приёмов работы пользователя ПЭВМ: гигиенических и психофизиологических, антропометрических и эстетических может повлечь снижение эффективности действий человека.

Наиболее правильная организация рабочего места позволяет значительно снять напряженность в работе, уменьшить неблагоприятные чрезмерные нагрузки на организм и, как следствие, повысить производительность труда.

Место для работы на компьютере и взаиморасположение всех его элементов должно соответствовать антропометрическим, физическим и психологическим требованиям. При устройстве рабочего места человека, работающего за ПК необходимо соблюсти следующие основные условия: наилучшее местоположение оборудования и свободное рабочее пространство.

Основными элементами рабочего места являются стол и стул, т.к. рабочим положением является положение сидя. Рациональная планировка рабочего места определяет порядок и местоположение предметов, в особенности тех, которые для работ необходимы чаще.

Основные зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости показаны на рисунок 5.1.

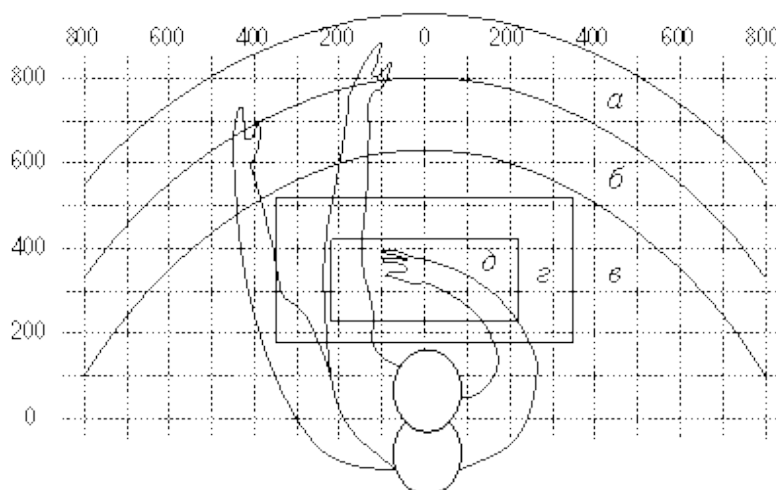


Рисунок 5.1 – Зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости: а – зона максимальной досягаемости; б – зона досягаемости пальцев при вытянутой руке; в –

зона легкой досягаемости ладони; г – оптимальное пространство для грубой работы; д – оптимальное пространство для тонкой работы

В соответствии с этим, принимается следующее оптимальное размещение предметов труда и документации в зонах досягаемости:

1. дисплей размещается в зоне а (в центре);
2. системный блок размещается в предусмотренной нише стола;
3. клавиатура - в зоне г/д;
4. манипулятор «компьютерная мышь» - в зоне в справа;
5. сканер в зоне а/б (слева);
6. принтер находится в зоне а (справа);
7. документация, необходимая при работе в зоне в, а в выдвижных ящиках стола - литература, используемая не постоянно.

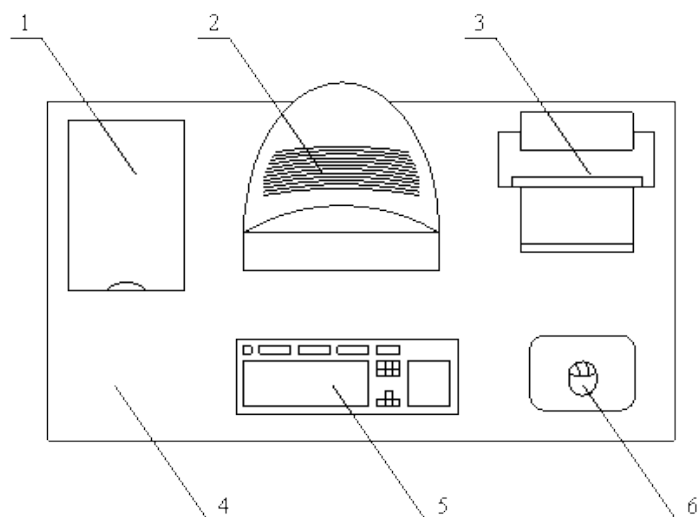


Рисунок 5.2 – Пример размещения основных и периферийных составляющих ПК на рабочем столе: 1 – сканер, 2 – монитор, 3 – принтер, 4 – поверхность рабочего стола, 5 – клавиатура, 6 – манипулятор типа «мышь»

При проектировании письменного стола должны быть учтены следующие требования.

Высота рабочей поверхности стола рекомендуется в пределах 680–800 мм. Высота рабочей поверхности, на которую устанавливается клавиатура,

должна быть 650 мм. Рабочий стол должен быть шириной не менее 700 мм и длиной не менее 1400 мм. Должно иметься пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной — не менее 500 мм, глубиной на уровне колен — не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног — не менее 650 мм.

Рабочее кресло должно быть подъёмно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а также расстоянию спинки до переднего края сиденья. Рекомендуется высота сиденья над уровнем пола 420–550 мм. Конструкция рабочего кресла должна обеспечивать: ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм.

Монитор должен быть расположен на уровне глаз оператора на расстоянии 500–600 мм. Согласно нормам, угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45° к нормали экрана. Лучше если угол обзора будет составлять 30°. Кроме того должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране. Должна предусматриваться возможность регулирования экрана.

Рабочие места с компьютерами должны размещаться так, чтобы расстояние от экрана одного монитора до тыла другого было не менее 2,0 м, а расстояние между боковыми поверхностями мониторов - не менее 1,2 м.

Общие требования к организации и оборудованию рабочих мест с ПЭВМ даны в СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Все параметры рабочего стола удовлетворяют нормативным требованиям.

Для внутренней отделки интерьера помещений, должны использоваться диффузно отражающие материалы с коэффициентом отражения для потолка - 0,7 - 0,8; для стен - 0,5 - 0,6; для пола - 0,3 - 0,5.

Для прекращения неблагоприятного воздействия вредных факторов при работе с ВДТ и ПЭВМ определены санитарно-гигиенические требования к обеспечению безопасных условий труда. Последствия воздействия этих

факторов на организм оператора ЭВМ зависят от их интенсивности, продолжительности и режимов действия.

5.1.1 Воздействие электромагнитного поля и ионизирующего излучения

Известно, что ПЭВМ являются источником электромагнитного поля (ЭМП) радиочастотного диапазона. При длительном постоянном воздействии, которого на организм человека наблюдаются нарушения сердечнососудистой, дыхательной и нервной систем, появляется утомляемость, ухудшение самочувствия, гипотония, также характерна головная боль, изменение проводимости сердечной мышцы. Тепловое воздействие ЭМП характеризуется повышением температуры тела, локальным избирательным нагревом тканей, органов, клеток вследствие перехода ЭМП в тепловую энергию.

При работе с компьютером допустимые уровни электромагнитных полей (ЭМП) нормируются СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03:

1. Напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг ПЭВМ по электрической составляющей должна быть не более:

- В диапазоне частот 5Гц-2кГц - 25В/м;
- В диапазоне частот 2кГц/400кГц - 2,5В/м.

2. Плотность магнитного потока должна быть не более:

- В диапазоне частот 5Гц-2кГц - 250нТл;
- В диапазоне частот 2кГц/400кГц - 25нТл.

3. Напряжённость электростатического поля должна быть 15 кВ/м;

4. Электростатический потенциал экрана видеомонитора – 500 В.

В данном случае воздействие ЭМП происходит только от монитора компьютера. Исходя из паспортных данных компьютера и монитора, они соответствуют нормам ТСО-99, ТСО-03.

Ионизирующее излучение вызывает в организме цепочку обратимых и необратимых последствий. Ионизирующая радиация при воздействии на организм человека может вызвать два вида эффектов: детерминированные пороговые эффекты (лучевая болезнь, лучевой ожог, лучевая катаракта, лучевое бесплодие и др.) и стохастические (вероятностные) беспороговые эффекты (злокачественные опухоли, лейкозы, наследственные болезни).

Оценка уровней ионизирующих излучений проводится при работе компьютерами, оснащенными мониторами с электроннолучевой трубкой. В данном случае работа велась за компьютером, снабженным монитором с жидкокристаллическим дисплеем, поэтому оценка параметров по данному пункту раздела не проводилась.

5.1.2 Электростатическое поле

Электризация заключается в следующем: нейтральные тела, в нормальном состоянии не проявляющие электрических свойств, при условии отрицательных контактов или взаимодействий становятся электрозаряженными. Опасность возникновения статического электричества проявляется в возможности образования электрической искры и вредном воздействии его на человеческий организм, и не только в случае непосредственного контакта с зарядом, но и за счет действий электрического поля, которое возникает при заряде. При включенном питании компьютера на экране дисплея накапливается статическое электричество. Электрический ток искрового разряда статического электричества мал и не может вызвать поражение человека. Тем не менее, вблизи экрана электризуется пыль и оседает на нем. В результате чего искажается резкость восприятия информации на экране. Кроме того, пыль попадает на лицо работающего и в его дыхательные пути.

Основные способы защиты от статического электричества следующие: заземление оборудования, увлажнение окружающего воздуха. Также целесообразно применение полов из антистатического материала.

5.1.3 Производственный шум и вибрация

Вентиляция производственных помещений предназначена для уменьшения запыленности, задымленности и очистки воздуха от вредных выделений производства, а также для сохранности оборудования. Она служит одним из главных средств оздоровления условий труда, повышения производительности и предотвращения опасности профессиональных заболеваний. Система вентиляции обеспечивает снижение содержания в воздухе помещения пыли, газов до концентрации, не превышающей ПДК.

Проветривание помещения проводят, открывая форточки. Проветривание помещений в холодный период года допускается не более однократного в час, при этом нужно следить, чтобы не было снижения температуры внутри помещения ниже допустимой. Воздухообмен в помещении можно значительно сократить, если улавливать вредные вещества в местах их выделения, не допуская их распространения по помещению. Для этого используют приточно-вытяжную вентиляцию. Кратность воздухообмена не ниже 3.

Предельно допустимый уровень (ПДУ) шума – это уровень фактора, который при ежедневной (кроме выходных дней) работе, но не более 40 часов в неделю в течение всего рабочего стажа, не должен вызывать заболеваний или отклонений в состоянии здоровья, обнаруживаемых современными методами исследований в процессе работы или в отдаленные сроки жизни настоящего и последующих поколений. Соблюдение ПДУ шума не исключает нарушения здоровья у сверхчувствительных лиц.

Допустимый уровень шума ограничен ГОСТ 12.1.003-83 и СанПиН 2.2.4/2.1.8.10-32-2002. Уровень шума на рабочем месте математиков-

программистов и операторов видеоматериалов не должен превышать 50дБА, а в залах обработки информации на вычислительных машинах - 65дБА.

Защита от шумов – заключение вентиляторов в защитный кожух и установление их внутри корпуса ЭВМ. Для снижения уровня шума стены и потолок помещений, где установлены компьютеры, могут быть облицованы звукопоглощающими материалами с максимальными коэффициентами звукопоглощения в области частот 63 - 8000 Гц.

Кроме того, для снижения шума на рабочем месте, можно применить следующие действия:

- установить пластиковые окна, для улучшения шумоизоляции;
- использовать звукопоглощающие материалы, такие как пенополистерол, поролоновые маты, пробковые полотна и плиты;
- устройство подвесного потолка, который служит звукопоглощающим экраном

5.1.4 Микроклимат в помещении

Микроклимат производственных помещений – это климат внутренней среды помещений, который определяется действующими на организм сочетаниями температуры, влажности и скорости движения воздуха, а также температуры окружающих поверхностей. Показатели микроклимата должны обеспечивать сохранение теплового баланса человека с окружающей средой и поддержание оптимального или допустимого теплового состояния организма человека [17].

Оптимальные микроклиматические при воздействии на человека в течение рабочей смены обеспечивают сохранение теплового состояния организма и не вызывают отклонений в состоянии здоровья. Допустимые микроклиматические условия могут приводить к незначительным

дискомфортным тепловым ощущениям. Возможно, временное (в течение рабочей смены) снижение работоспособности, без нарушения здоровья.

Нормы оптимальных и допустимых метеорологических условий устанавливает СанПиН 2.2.4.548–96. Эти нормы устанавливаются в зависимости от времени года, характера трудового процесса и характера производственного помещения. Все категории работ разграничиваются на основе интенсивности энергозатрат организма в ккал/ч (Вт). Работа, выполняемая математиком-программистом, производимая сидя и сопровождающаяся незначительным физическим напряжением, относится к категории Ia – работа с интенсивностью энергозатрат до 120 ккал/ч (до 139 Вт). Для данной категории допустимые нормы микроклимата помещения представлены в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Допустимые нормы микроклимата в рабочей зоне производственных помещений

Сезон года	Категория тяжести выполняемых работ	Температура, С°		Относительная влажность, %		Скорость движения воздуха, м/сек	
		Фактическое значение	Допустимое значение	Фактическое значение	Допустимое значение	Фактическое значение	Допустимое значение
Холодный	Ia	(21÷23)	(20÷25)	55	(15÷75)	0,1	0,1
Теплый	Ia	(22÷24)	(15÷28)	55	(20÷80)	0,1	0,5

Анализируя, данные таблицы 1 и состояние рабочей комнаты, микроклимат которой поддерживается на оптимальном уровне системой водяного центрального отопления и естественной вентиляцией, можно сделать вывод, что параметры микроклимата производственного помещения соответствуют нормам.

В производственных помещениях, где допустимые нормативные величины микроклимата поддерживать не представляется возможным, необходимо проводить мероприятия по защите работников от возможного перегрева и охлаждения. Это достигается различными средствами: применением систем местного кондиционирования воздуха; использованием индивидуальных средств защиты от повышенной или пониженной температуры; регламентацией периодов работы в неблагоприятном микроклимате и отдыха в помещении с микроклиматом, нормализующим тепловое состояние; сокращением рабочей смены и др.

5.1.5 Освещенность рабочей зоны

Освещение – важнейший фактор создания нормальных условий труда для работника. В случае недостатка освещенности рабочего места у человека не только уменьшается острота зрения, но и вызывается утомление организма в целом, что приводит к снижению производительности труда и увеличению опасности заболеваний.

Согласно санитарно-гигиеническим требованиям рабочее место с ПЭВМ должно освещаться комбинированным освещением. Естественное освещение поступает в помещение через одно окно в светлое время суток. Искусственное освещение обеспечивается за счет люминесцентных ламп типа ЛБ, в темное время суток, либо при недостаточном естественном освещении. Оно отличается относительной сложностью восприятия его зрительным органом человека.

С целью обеспечения требуемых норм освещенности необходимо произвести расчёт искусственной освещенности.

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим световой поток, отражённый от потолка и стен.

Дано: длина помещения $A = 8$ м, ширина $B = 4$ м, высота $H = 3$ м. Высота рабочей поверхности над полом $h_p = 0,8$ м. Интегральным

критерием оптимальности расположения светильников является величина λ , которая для люминесцентных светильников без защитной решётки равна 1,4.

Выбираем светильники с люминесцентными лампами типа ШОД-2-40. Этот светильник имеет две лампы мощностью 40 Вт каждая, длина светильника равна 1228 мм, ширина – 284 мм.

На первом этапе определим значение индекса освещенности i .

$$i = \frac{S}{(a + b)h}, \quad (5.1)$$

где: S – площадь помещения;

h – расчетная высота подвеса светильника, м;

a и b – длина и ширина помещения, м.

Приняв $h_c = 0,5$ м, получим высоту светильника над рабочей поверхностью h

$$h = H - h_p - h_c = 3 - 0,8 - 0,5 = 1,7 \text{ м} \quad (5.2)$$

где H - высота помещения, м;

h_p - высота рабочей поверхности, м.

В результате проведенных расчетов, индекс освещенности i равен

$$i = \frac{S}{(a + b)h} = \frac{32}{(4 + 8) \cdot 1,7} = 1,57.$$

Расстояние между соседними светильниками или рядами определяется по формуле:

$$L = \lambda \cdot h = 1,4 \cdot 1,57 = 2,198 \text{ м.}$$

Расстояние от крайних светильников или рядов до стены определяется по формуле:

$$l = \frac{L}{3} = \frac{2,198}{3} = 0,74 \text{ м}$$

Размещаем светильники в 2 ряда. В каждом ряду можно установить 4 светильника типа ШОД-2-40 (с длиной 1,228м), при этом разрывы между светильниками в ряду составят 50 см. Учитывая, что в каждом светильнике установлено две лампы, общее число ламп в помещении $N = 16$.

Световой поток лампы определяется по формуле:

$$\Phi = \frac{E_H \cdot S \cdot K_z \cdot Z}{N \cdot \eta}, \quad (5.3)$$

где E_H – нормируемая минимальная освещённость по СНиП 23-05-95, лк;

S – площадь освещаемого помещения, м²;

K_z – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника (источника света, светотехнической арматуры, стен и пр., т. е. отражающих поверхностей), наличие в атмосфере цеха дыма, пыли;

Z – коэффициент неравномерности освещения, отношение E_{cp} / E_{min} . Для люминесцентных ламп при расчётах берётся равным 1,1;

N – число ламп в помещении;

η – коэффициент использования светового потока.

Данное помещение относится к типу помещения со средним выделением пыли, в связи с этим $K_z = 1,5$; состояние потолка – свежепобеленный, поэтому значение коэффициента отражения потолка $\rho_n = 70$; состояние стен – побеленные бетонные стены, поэтому значение коэффициента отражения стен $\rho_c = 50$. Коэффициент использования светового потока, показывающий какая часть светового потока ламп попадает на рабочую поверхность, для светильников типа ШОД с люминесцентными лампами при $\rho_n = 70\%$, $\rho_c = 50\%$ и индексе помещения $i = 1,57$ равен $\eta = 0,47$.

Необходимо создать освещение $E = 300$ лк.

$$\Phi = \frac{E_H \cdot S \cdot K_z \cdot Z}{N \cdot \eta} = \frac{300 \cdot 32 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{16 \cdot 0,47} = 2106 \text{ Лм}$$

Выбираем лампу дневного освещения типа ЛД-40, световой поток которой равен $\Phi_{ЛД} = 2300$ Лм. Делаем проверку условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{ЛД} - \Phi_{л.расч}}{\Phi_{ЛД}} \cdot 100\% \leq 20\%$$

$$\frac{2300 - 2106}{2300} \cdot 100\% = 8,43\%$$

$$-10\% \leq 8,43\% \leq 20\%$$

Таким образом необходимый световой поток светильника не выходит за пределы требуемого диапазона.

Определяем электрическую мощность осветительной установки

$$P = 16 \cdot 40 = 640 \text{ Вт}$$

5.1.6 Психофизиологические факторы

Значительное умственное напряжение и другие нагрузки приводят к переутомлению функционального состояния центральной нервной системы, нервно-мышечного аппарата рук. Нерациональное расположение элементов рабочего места вызывает необходимость поддержания вынужденной рабочей позы. Длительный дискомфорт вызывает повышенное позвоночное напряжение мышц и обуславливает развитие общего утомления и снижение работоспособности.

При длительной работе за экраном дисплея появляется выраженное напряжение зрительного аппарата с появлением жалоб на неудовлетворительность работы, головные боли, усталость и болезненное ощущение в глазах, в пояснице, в области шеи, руках.

Режим труда и отдыха работника: при вводе данных, редактировании программ, чтении информации с экрана непрерывная продолжительность работы не должна превышать 4-х часов при 8-часовом рабочем дне. Через

каждый час работы необходимо делать, перерыв на 5-10 минут, а через два часа на 15 минут.

С целью снижения или устранения нервно-психологического, зрительного и мышечного напряжения, предупреждение переутомления необходимо проводить комплекс физических упражнений и сеансы психофизической разгрузки и снятия усталости во время регламентируемых перерывов, и после окончания рабочего дня.

5.2 Электробезопасность

Электробезопасность представляет собой систему организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока, электрической дуги, электромагнитного поля и статистического электричества.

Электроустановки классифицируют по напряжению: с номинальным напряжением до 1000 В (помещения без повышенной опасности), до 1000 В с присутствием агрессивной среды (помещения с повышенной опасностью) и свыше 1000 В (помещения особо опасные).

В отношении опасности поражения людей электрическим током различают:

1. Помещения без повышенной опасности, в которых отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность.
2. Помещения с повышенной опасностью, которые характеризуются наличием в них одного из следующих условий, создающих повышенную опасность: сырость, токопроводящая пыль, токопроводящие полы (металлические, земляные, железобетонные, кирпичные и т.п.), высокая температура, возможность одновременного прикосновения человека к имеющим соединение с землей металлоконструкциям, технологическим аппаратам, с одной стороны, и к металлическим корпусам электрооборудования - с другой.

3. Особо опасные помещения, которые характеризуются наличием оборудования свыше 1000 В и одного из следующих условий, создающих особую опасность: особой сырости, химически активной или органической среды, одновременно двух или более условий повышенной опасности. Территории размещения наружных электроустановок в отношении опасности поражения людей электрическим током приравниваются к особо опасным помещениям.

Помещение, где была разработана магистерская диссертация, принадлежит к категории помещений без повышенной опасности по степени вероятности поражения электрическим током, вследствие этого к оборудованию предъявляются следующие требования:

- экран монитора должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя (расстояния от источника);

- применение приэкранных фильтров, специальных экранов.

К средствам коллективной защиты от электрического тока можно отнести:

- защитное заземление;
- зануление;
- разделительные трансформаторы;
- защитное отключение;
- применение малых напряжений;
- изоляция;
- оградительные устройства;
- сигнализация, блокировка, знаки безопасности, плакаты.

Защитное заземление — это преднамеренное электрическое соединение с землей или ее эквивалентом металлических нетоковедущих частей, которые могут оказаться под напряжением.

Сопротивление заземления — основной показатель заземляющего устройства, определяющий его способность выполнять свои функции и определяющий его качество в целом.

Сопротивление заземления зависит от площади электрического контакта заземлителя (заземляющих электродов) с грунтом (“стекание” тока) и удельного электрического сопротивления грунта, в котором смонтирован этот заземлитель (“впитывание” тока). Согласно ПЭУ номинальное сопротивление заземления должно быть не более 4 Ом.

К основным электрозащитным средствам в электроустановках напряжением до 1000 В относятся:

- изолирующие штанги;
- изолирующие и электроизмерительные клещи;
- диэлектрические перчатки; изолированный инструмент.

Работать со штангой разрешается только специально обученному персоналу в присутствии лица, контролирующего действия работающего. При операциях с изолирующей штангой необходимо пользоваться дополнительными изолирующими защитными средствами — диэлектрическими перчатками и изолирующими основаниями (подставками, ковриками) или диэлектрическими ботами.

Изолирующие клещи применяют в электроустановках до 35 кВ для операций под напряжением с плавкими вставками трубчатых предохранителей, а также для надевания и снятия изолирующих колпаков на ножи однополюсных разъединителей. Изолирующие клещи выполняют из пластмассы.

При пользовании изолирующими клещами оператор должен надевать диэлектрические перчатки и быть изолированным от пола или грунта; при смене патронов трубчатых предохранителей он должен быть в очках. Клещи нужно держать в вытянутых руках.

К дополнительным изолирующим электрозащитным средствам относятся диэлектрические перчатки, боты, резиновые коврики и дорожки, изолирующие подставки на фарфоровых изоляторах и переносные заземления.

Перед началом работы следует убедиться в отсутствии свешивающихся со стола или висящих под столом проводов электропитания, в целостности вилки и провода электропитания, в отсутствии видимых повреждений аппаратуры и рабочей мебели, в отсутствии повреждений и наличии заземления приэкранного фильтра.

Безопасные номиналы: $U = 12-36\text{В}$, $I = 0,1\text{ А}$, $R_{\text{заз}} = 4\text{ Ом}$.

5.3 Экологичность разрабатываемой темы

Охрана окружающей среды - это комплексная проблема и наиболее активная форма её решения - это сокращение вредных выбросов промышленных предприятий через полный переход к безотходным или малоотходным технологиям производства.

С точки зрения потребления ресурсов компьютер потребляет сравнительно небольшое количество электроэнергии, что положительным образом сказывается на общей экономии потребления электроэнергии в целом.

Современные ПЭВМ производят практически без использования вредных веществ, опасных для человека и окружающей среды. Исключением являются аккумуляторные батареи компьютеров и мобильных устройств. В аккумуляторах содержатся тяжёлые металлы, кислоты и щелочи, которые могут наносить ущерб окружающей среде, попадая в гидросферу и литосферу, если они были неправильно утилизированы. Для утилизации аккумуляторов необходимо обращаться в специальные организации, специализировано занимающиеся приёмом, утилизацией и переработкой аккумуляторных батарей.

Люминесцентные лампы, применяющиеся для искусственного освещения рабочих мест, также требуют особой утилизации, т.к. в них присутствует от 10 до 70 мг ртути, которая относится к чрезвычайно-опасным химическим

веществам и может стать причиной отравления живых существ, а также загрязнения атмосферы, гидросферы и литосферы. Сроки службы таких ламп составляют около 5-ти лет, после чего их необходимо сдавать на переработку в специальных пунктах приёма. Юридические лица обязаны сдавать лампы на переработку и вести паспорт для данного вида отходов [19].

При выполнении магистерской диссертации никакого ущерба окружающей среде нанесено не было.

5.4 Защита в чрезвычайных ситуациях

Чрезвычайная ситуация – обстановка на определенной территории, сложившаяся в результате аварии, опасного природного явления, катастрофы, стихийного или иного бедствия, которые могут повлечь за собой человеческие жертвы, ущерб здоровью людей или окружающей среде, материальные потери и нарушение условий жизнедеятельности людей.

В помещении, где была разработана магистерская диссертация, возможны следующие чрезвычайные ситуации: пожар, взрывы, террористические акты и диверсии.

Анализируя выше представленные ситуации и само помещение, можно сделать вывод, что наиболее типичной ЧС является пожар.

В Томске преобладает резко-континентальный климат. Природные явления (землетрясения, наводнения, засухи, ураганы и т. д.) отсутствуют.

Для обеспечения безопасности людей и сохранения материальных ценностей существует пожарная безопасность, основными системами которой являются системы предотвращения пожара и противопожарной защиты, включая организационно-технические мероприятия.

Пожар представляет большую опасность и наносит огромный ущерб, поскольку грозит уничтожением приборов, компьютеров, инструментов и комплектов документов, представляющих значительную ценность. Кроме того, пожар характеризуется опасностью для жизни человека. Возникновение пожара

в комнате может быть обусловлено следующими факторами: в современных ПЭВМ очень высокая плотность размещения электронных схем. При протекании по ним электрического тока выделяется значительное количество тепла, что может привести к повышению температуры отдельных узлов до 100°C. При этом возможно оплавление изоляции соединительных проводов, их оголение, и, как следствие, короткое замыкание, сопровождаемое искрением [17].

Поэтому во избежание пожаров проводится пожарная профилактика – комплекс организационных и технических мероприятий, направленных на обеспечение безопасности людей, на предотвращение пожара, ограничение его распространения, а также на создание условий для успешного тушения пожара. Успех борьбы с пожаром во многом зависит от его своевременного обнаружения и быстрого принятия мер по его ограничению и ликвидации. Основы противопожарной защиты предприятий определены в стандартах ГОСТ 12.1.004-76 и ГОСТ 12.1.010-76.

Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой может быть по причинам как электрического, так и неэлектрического характера.

Причины возникновения пожара неэлектрического характера:

- а) халатное неосторожное обращение с огнем (курение, оставленные без присмотра нагревательные приборы, использование открытого огня);
- б) самовоспламенение и самовозгорание веществ.

Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, искрение и электрические дуги, статическое электричество и т. п.

При эксплуатации ПЭВМ возможны возникновения следующих аварийных ситуаций: короткие замыкания, перегрузки, повышение переходных сопротивлений в электрических контактах, перенапряжение, возникновение токов утечки.

При возникновении аварийных ситуаций происходит резкое выделение тепловой энергии, которая может явиться причиной возникновения пожара.

Мероприятия по пожарной безопасности делятся на пожарную профилактику и тушение пожаров. Меры пожарной профилактики могут быть следующие: строительно-планировочные, технические и организационные.

Строительно-планировочные меры определяются огнестойкостью зданий и сооружений (выбор материалов конструкций по степени огнестойкости). В зависимости от степени огнестойкости определяются наибольшие дополнительные расстояния от выходов для эвакуации при пожарах.

Технические меры включают в себя соблюдение противопожарных норм для систем отопления, освещения, электрического обеспечения и т.д., использование разнообразных защитных систем и соблюдение параметров технологических процессов и режимов работы оборудования.

Организационные меры представляют собой проведение инструктажа персонала по пожарной безопасности, соблюдение мер пожарной безопасности, разработку планов эвакуации людей в случае пожара.

Для предупреждения возникновения пожара необходимо соблюдать следующие правила пожарной безопасности:

- правильная эксплуатация оборудования и содержание зданий и территорий;
- противопожарный инструктаж рабочих и служащих;
- обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности;
- издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации;
- соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, освещения;
- правильное размещение оборудования;

— своевременный профилактический осмотр, ремонт и испытание оборудования.

Согласно правилам пожарной безопасности, в Российской Федерации, в зависимости от характеристики используемых в производстве веществ и их количества, по пожарной и взрывной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г, Д. Так как помещение по степени пожаровзрывоопасности относится к категории В, т.е. к помещениям с твердыми сгораемыми веществами такими, как деревянные шкафы, столы, двери.

В помещении для тушения возгораний предусмотрено использование углекислотного огнетушителя ОУ-3 для тушения возгораний классов А, В и электроустановок до 10000В при температуре воздуха -40°C до $+50^{\circ}\text{C}$. Таким образом, состояние помещения соответствует нормам пожаробезопасности.

Вывод к разделу

Проанализировав и оценив условия труда в рабочем помещении, где был разработан дипломный проект, можно сделать следующие выводы по производственной и экологической безопасности специалиста и работы, выполняемой им:

1. По занимаемой площади и объему помещение удовлетворяет нормативным требованиям.
2. Микроклимат, шумовая обстановка и система освещения в помещении соответствуют нормам и создают нормальные условия для работы.
3. Монитор компьютера служит источником ЭМП – вредного фактора, который отрицательно влияет на здоровье работника при непрерывной работе более 4 часов, во избежание негативного влияния на здоровье необходимо делать перерывы при работе с ЭВМ и проводить специализированные комплексы упражнений для глаз.
4. Помещение, в котором находится рабочее место, относится к помещениям без повышенной опасности поражения электрическим током.

Температурный режим, влажность воздуха, химическая среда не способствуют разрушению изоляции электрооборудования.

5. По состоянию пожаробезопасности помещение соответствует нормам.

6. При рассмотрении вопроса об охране окружающей среды можно сказать, что деятельность помещения не является экологически опасной.

Заключение

- Получена система дифференциальных уравнений, описывающая взаимосвязанный рост ε и γ' нитридных слоев железа, динамика которых зависит от времени, коэффициента диффузии и скорости распыления.
- Проведено исследование влияния температуры азотирования, концентрации азота на поверхности железа и распыления ионами обрабатываемой поверхности на динамику слоев и распределение концентрации азота.
- Показано, что скорость роста каждого слоя была высокая на начальных стадиях процесса азотирования, при увеличении скорости распыления время насыщения азотом и ширина слоев уменьшаются.
- Математическая модель формирования нитридных слоев может быть использована для расчета толщины составного слоя в различных процессах азотирования.

Список используемых источников

1. Калинин, Б.А. Перспективные радиационно-пучковые технологии обработки материалов: Учебник / В.А. Грибков, Ф.И. Григорьев, Б.А. Калинин, В.Л. Якушин/ под ред. Б.А. Калинина. М: Круглый год, 2001. – 528 с.
2. Современные тенденции модифицирования структуры и свойств материалов.: под ред. Н. Н. Коваля и В. Е. Громова; Томск: Изд-во НТЛ, 2015. – 378 с.
3. Модификация материалов компрессионными плазменными потоками / В. В. Углов [и др.]. – Минск: БГУ, 2013. – 248 с.
4. Engelko, V., Yatsenko B., Mueller G., Bluhm H. Pulsed electron beam facility (GESA) for surface treatment of materials // Vacuum. – 2001. – V. 62/2–3. – P. 211–216
5. Лопатин И. В. Генерация объемной плазмы в разрядах низкого давления с полым катодом для азотирования поверхности металлов: дис. канд. тех. наук: 05.27.02 / Лопатин Илья Викторович; [Место защиты: Ин-т сильноточ. электроники]. - Томск, 2013. - 161 с.: ил. РГБ ОД, 61 14-5/1429.
6. Akhmadeev Yu. N., Lopatin I. V., Koval N. N., Schanin P. M., Kolobov Yu. R., Vershinin D. S., Smolyakova M. Yu. // Proc. of 10th Int. Conf. (Tomsk: Russia, 19-24 September 2010), – P. 228-231.
7. Рябчиков, А. Модификация стали 40Х при высокоинтенсивной имплантации ионов азота / Рябчиков, А., Сивин, Д. О., Ананьин, П. С., Иванова, А. И., Углов, В. В., & Корнева, О. С. // Известия высших учебных заведений. Физика (2018), 61(2), 60-66.
8. Ryabchikov, A. I. Nitriding of steel 40x with a high-intensity ion beam / Ryabchikov, A. I., An, T. M. K., Koval, T. V., Sivin, D. O., Anan'in, P. S., & Korneva, O. S. // In Journal of Physics (2018, November): Conference Series (Vol. 1115, No. 3, p. 032019). IOP Publishing

9. Б.С.Бокштейн. Диффузия в металлах. Издательство Металлургия, 119034, Москва, 1978, - 245 с
10. Г.А. Блейхер, В.П. Кривобоков. Теоретические основы обработки материалов импульсными электронными материалами и ионными пучками. Учеб. Пособие. Издательство ТПУ, Томск 2009. – 227 с.
11. Лахтин Ю.М., Леонтьева В.П. Материаловедение: Учебник для высших технических заведений. – 3-е изд, перераб. и доп. – М.:Машиностроение, 1990. – 528 с.: ил.
12. Koval T. V. Numerical simulation of discharge plasma generation and nitriding the metals and alloys / Koval T. V., Manakov R. A., Nguyen Bao H., Tran My K. A. // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering – "XII International Conference Radiation-Thermal Effects and Processes in Inorganic Materials" 2016. Volume 168, conference 1. С. 012044.
13. Яловец А. П. Диффузионный массоперенос при плазменной обработке металлов / Яловец А. П., Лейви А. Я., Талала К. А. // 11-я Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым мелом», 23-25 сентября 2015 г. Минск, Беларусь. – С. 65-66.
14. Hosseini, S.R., Kermanpur, A. & Ashrafizadeh, F. (2007). Mathematical modelling of nitrogen depth profile in the nitriding of pure iron, Proc. 8th Conference Surface Engineering and Heat Treatment, Iranian Society of Surf. Sci. & Tech., Kerman, pp. 571-578.
15. Sun, Y. & Bell, T. (1997). A numerical model of plasma nitriding of low alloy steels. Mater. Sci. and Eng. A, Vol. 224, pp. 33-47
16. Фролов А.В., Бакаева Т.Н. Безопасность жизнедеятельности. Охрана труда. 2-е изд., доп. и перераб. - Ростов на Дону: Феникс, 2008. — 750 с.

17. С.В. Белов, А.В. Ильницкая, А.Ф. Козьяков и др. Безопасность жизнедеятельности: Учебник для вузов; Под общ. ред. С.В. Белова. 7-е изд., стер. – М.: Высш.шк., 2007. – 616 с
18. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 «Гигиенические требования к ПК и организации работы».
19. СанПиН 2.1.7.1322-03.

Приложение А
(обязательное)

II. Plasma beam processing of materials

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
8БМ71	Набокова Ольга Олеговна		

Консультант школы ИШИТР отделения информационных технологий

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Коваль Т. В.	д.ф-м.н, проф.		

Консультант – лингвист отделения иностранных языков школы ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сидоренко Т.В.	к.пед.н.		

2.1 Nitriding of metals (gas, plasma, beam)

Nitriding of metals is called the process of surface metal saturation with nitrogen.

Nitriding, as well as cementation, is subjected to parts working for wear and perceiving alternating loads. Nitrided parts have the following advantages: high hardness, wear resistance, heat resistance and corrosion resistance. Since nitriding is mainly subjected to alloyed steels of certain compositions and the process has a longer duration (30-60 hours), its use is economically feasible only for processing critical tools and parts for aircraft engines, diesel engines, turbines, instruments, etc. [1- 4].

2.1.1 Gas nitriding

The saturation of the metal surface is carried out at temperatures ranging from 400 (for some steels) to 1200 (austenitic steels and refractory metals) degrees Celsius. The saturation medium is dissociated ammonia (NH_3). When ammonia comes into contact with the heated part, it dissociates into nitrogen and hydrogen. Various catalysts are also used to accelerate dissociation. The nitrogen then diffuses to the surface of the material, creating a layer of nitride. To control the structure and mechanical properties of the layer in the gas nitriding of steels are used:

- two-, three-stage temperature conditions of saturation.
- dilution of dissociated ammonia (air, hydrogen).

2.1.2 Catalytic gas nitriding

The latest modification of gas nitriding technology. The environment for saturation is ammonia, dissociated at a temperature of 400–600 degrees Celsius on the catalyst in the working space of the furnace. To control the structure and

mechanical properties of the layer during the catalytic gas nitriding of steels, a change in the saturation potential is used. In general, lower temperatures are used than with gas nitriding.

2.1.3 Ion plasma nitriding

Technology of saturation of metal products in a nitrogen-containing vacuum (approximately 0.01 atm.), in which a glowing electrical discharge is excited. The anode is the wall of the heating chamber, and the cathode is the workpiece.

Plasma nitrogen of high density is formed in the cathode region by a beam of electrons generated and accelerated by the auxiliary anode. The electrons emitted from the electron gun are directed to the anode and to the auxiliary anode, creating an electron gas stream providing the collision of electrons with neutral particles and maintaining the existence of the plasma. An auxiliary anode connected to its own power source controls the electron velocity. To control the structure of the layer and the mechanical properties of the layer used (at different stages of the process):

- change in current density
- change in nitrogen flow
- change in the degree of discharge
- additives to nitrogen of particularly pure process gases (hydrogen, argon, methane, oxygen)

Figure 2.1 shows the scheme of implementation of the method of vacuum ion-plasma nitriding of steel products.

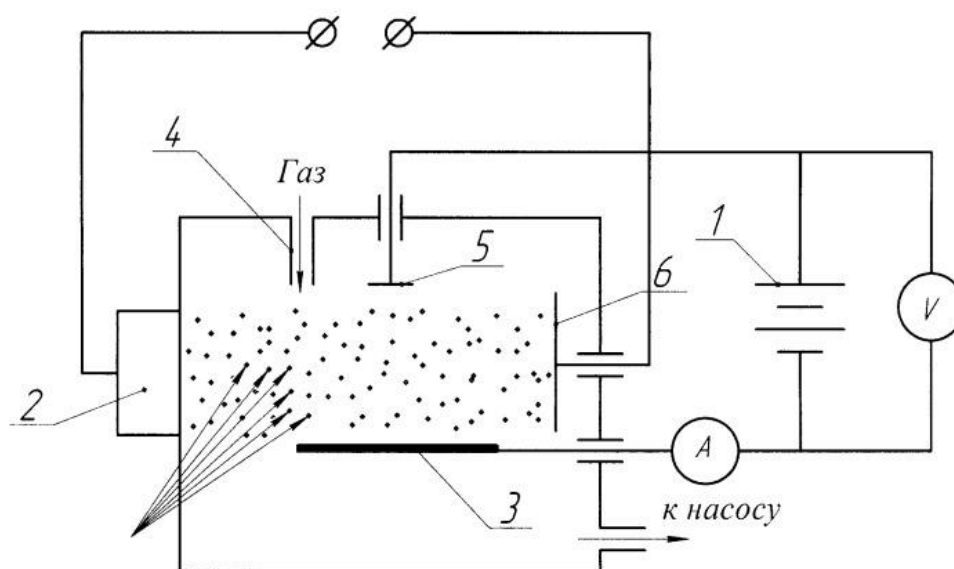


Figure 2.1 – Diagram contains: 1-power supply, 2-electron gun, 3-cathode-part, 4-working gas supply unit, 5-anode, 6-auxiliary anode [11]

2.2 Formation of ion-modified layers. Diagram of Phase States Fe-N

The solubility of nitrogen in iron at room temperature is very limited and reaches a maximum of 0.4 at.% (0.1 wt.%) at 592 ° C. In the process of nitriding of iron, when the concentration of nitrogen exceeds the limit of solubility, additional nitrogen atoms form stoichiometric compounds with iron atoms, therefore, intermediate iron nitrides are indicated.

The surface composition of nitrated iron can be predicted, by considering the binary phase diagram of Fe-N. Based on this diagram [11], in the process of nitriding, theoretically several phases and compounds can be formed, including alpha (α), gamma (γ), simple gamma (γ'), epsilon (ϵ), zeta (ξ), etc.

A phase diagram is a graphic description of the compositions and relative amounts of phases depending on the chemical composition and on the external conditions. The external conditions can be: temperature, pressure, magnetic field strength, gravity, chemical potential of a completely mobile component, and so on.

The most common are phase diagrams, showing phase relations arising from the interaction of two chemical elements depending on temperature. Such diagrams are called two-component phase diagrams depending on temperature or two-component T-x phase diagrams.

The state diagram of the Fe-N system is of practical importance due to the wide industrial use of steel nitriding.

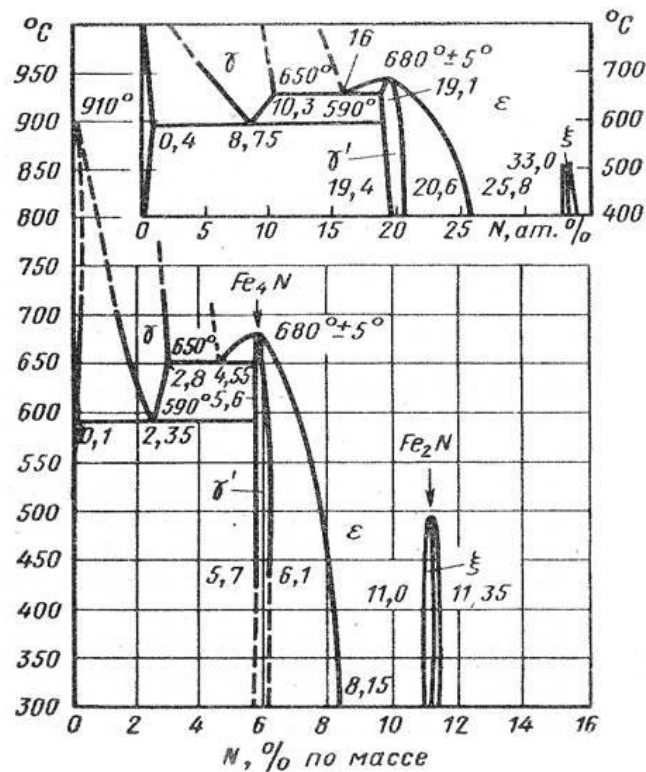


Figure 2.2 – Diagram of phase states of the system Fe-N [11]

The concentration of nitrogen in equilibrium with gaseous nitrogen increases with increasing temperature. At the transition point, $\alpha \rightarrow \gamma$ (906 ° C) changes abruptly, with further increase in temperature before the transition $\gamma \rightarrow \delta$ (1402 ° C), it decreases.

Nitrogen can form two compounds Fe₄N (9.9% N) and Fe₂N (11.5% N) with iron. Fe₂N begins to decompose at ~ 550 ° C. With a further increase in temperature, Fe₄N also begins to dissociate.

Phase α is a solid solution for introducing nitrogen α -Fe. The nitrogen solubility in α -Fe at 590 ° C is insignificant and amounts to 0.1% (by mass), or 0.4% (at.) N, therefore the lattice period of this solution almost coincides with the lattice period α -Fe.

Phase γ is a solid solution of introducing γ -Fe nitrogen isomorphic to austenite in the Fe-C system. The lattice period of the γ phase increases as the nitrogen content increases from 0.3637 nm (γ -Fe 910 ° C) to 0.3646 nm with a content of 8.67% (at.), or 2.33% (by weight) N.

Phase γ' has structure with a nitrogen atom located in the center of the cell. In a narrow region of homogeneity, the phase lattice period varies from 0.3791 to 0.3801 nm. The region of homogeneity of the γ' -phase at 500 ° C is in the range of 19.6 ... 19.95% (at.) N.

Phase ϵ has G.P.U. lattice with an ordered arrangement of nitrogen atoms. With an increase in nitrogen content from 19.42% (at.), or 5.7% (by weight) to 33.02% (at.), or 11.0% (by weight), the grating periods vary from $a = 0.2660$ nm; $c = 0.4343$ nm; $c / a = 1.633$ to $a = 0.276$ nm; $c = 0.4420$ nm; $c / a = 1.599$. The region of homogeneity of the ϵ -phase at 20 ° C is 26.0 ... 33.2% (at.), or 8.1 ... 11.1% (by weight) N.

2.3 Experimental results

In the experiments carried out in [5, 6], plasma is formed in a hollow cylindrical cathode, inside of which there is a part (s). During processing, the part serves as a cathode, a space charge layer is formed between the plasma and the part, in the electric field of which the plasma ions are accelerated. Thanks to ion bombardment, parts are heated and the process of nitriding is carried out.

Analysis of experimental results [6] shows that nitriding of steel 4140 in an atmosphere of pure nitrogen for 2 hours leads to an increase in microhardness on the surface and the depth of the sample (more than 3 times), a nitride layer (Fe_4N) is

formed, which has a thickness of 4 ... 10 microns depending on the composition of the gas mixture.

Figure 2.3 shows the experimental dependences of the distribution of nitrogen in steel 4140 (composition: Fe ~ 96%, Cr ~ 0.75 ... 1%, Mn ~ 0.75 ... 1%, C ~ 0.38 ... 0.43%, ...), here also shows the calculated dependencies [12] at $T = 500^\circ \text{C}$, obtained for iron and steel, taking into account the fact that it contains impurities in addition to iron, which affect the diffusion coefficients of nitrogen and the phase concentration of the saturated α -solution of C_α . In addition, the formation of stable nitrogen compounds with impurities leads to a blurring of phase boundaries. The results of the model [12] are consistent with the results of other authors [13] and experiment [6]

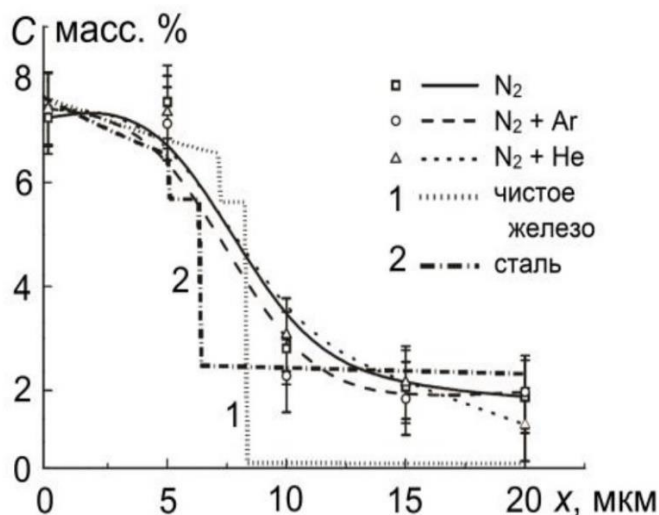


Figure 2.3. Experimental [7] and numerical distributions of nitrogen in pure iron (1) and steel (2) [12]

Nitriding of steel 4140 in a plasma of a non-independent glow discharge with a full cathode leads to the formation of a multilayer structure with a hardness of 10 ... 12 GPa on the surface and a sharp decrease to 2.5 GPa (initial microhardness) at a depth of 150 μm [6]. The surface layer (Figure 2.3) includes the nitride phases $\text{Fe}_2\text{-3N}$ and Fe_4N .

In work [7], it was shown that methods of plasma nitriding of 40X steels (composition: Fe ~ 97%, Cr ~ 0.8 ... 1.1%, Mn ~ 0.5 ... 0.8%, C ~ 0.36 ... 0.44%, ...) at a processing temperature of ~ 520° C allows to obtain modified layers up to several hundred micrometers deep in 2 ... 4 hours. The microhardness of the surface layer is 9 GPa. With the parameters of the experiment (ion energy 400 ... 250 eV, ion current density 1 ... 5 mA / cm²) surface sputtering is not significant compared with the width of the modified layer.

In the experiment [7, 8], the high-intensity effect on steel 40X of a 1.2-keV nitrogen ion beam is characterized by a significant ionic sputtering of the target surface at a current density of 10-500 mA / cm². After 80 min of processing (taking into account the target preheating by the ion beam for (~ 20 min)), a crater with a maximum depth in the center is formed on the surface of the 40X steel sample, the maximum depth of which coincides with the maximum distribution of the ion beam current density (Figure 2.4) [eight].

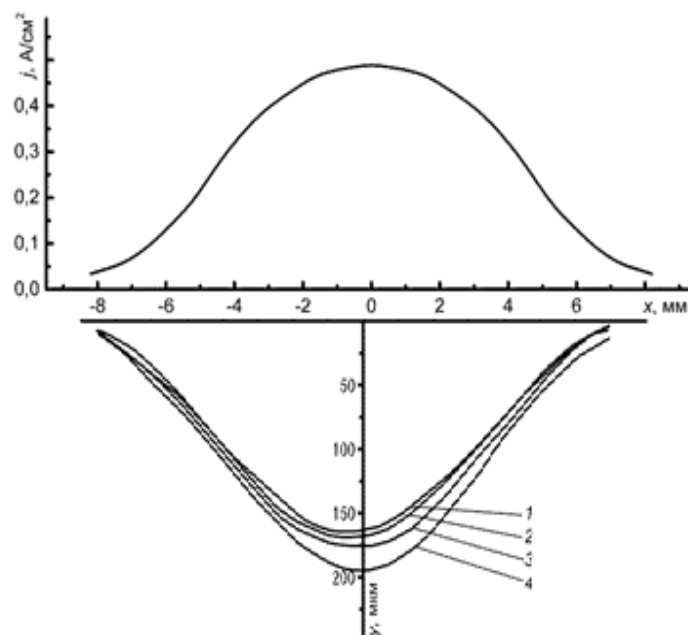


Figure 2.4. The distribution of ion current density (j) over the cross section of the nitrogen ion beam and the cross section of the surface of modified samples in the region of the

maximum crater depth after ion sputtering at different process temperatures: 1 – 450 ° C; 2
500 ° C; 3 580 ° C; 4 – 650 ° C [8]

The maximum ion current density is 0.5 A / cm² on the sample on the axis of symmetry of the beam with an ion current of 0.6 A. The configuration of the crater and the distribution of the current density correlate with each other.